# 2.1 Teilprojekt C4

Parallele Implementierung von stochastischen Optimierungsverfahren und deren Anwendung

## 2.1.1 Antragsteller

Prof. Dr. Karl Heinz Hoffmann
29.7.1953
Theoretische Physik, insbesondere Computerphysik
Institut für Physik
Fakultät für Naturwissenschaften
Technische Universität Chemnitz
09107 Chemnitz
Telefon: (0371) 531-3212
e-mail: hoffmann@physik.tu-chemnitz.de

## 2.1.2 Projektbearbeiter

Prof. Dr. K. H. Hoffmann, Computerphysik
Dr. P. Blaudeck, Computerphysik
Dipl.-Phys. S. Schubert, Computerphysik
Dipl.-Phys. A. Fachat, Computerphysik
Dr. B. Heide, Computerphysik
Dipl.-Phys. J. Burzler, Computerphysik
Dr. S. Amelkin, Computerphysik
Prof. Dr. A. Meyer, Numerische Mathematik
Prof. Dr. M. Schreiber, Theoretische Festkörperphysik

# 2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojektes ist die parallele Implementierung stochastischer Optimierungsverfahren, insbesondere des Simulated Annealing (SA) und des Threshold Accepting (TA). Stochastische Optimierungsverfahren kommen vor allem dann zum Einsatz, wenn die Zielfunktion viele lokale Minima aufweist. Dies ist z.B. bei der Frage nach der Grundzustandsenergie von komplexen Systemen (Spingläser, Neuronale Netzwerke, mechatronische Systeme, thermodynamische Systeme, amorphe Materialien) der Fall.

Simulated Annealing ist enstanden in Analogie zum Auffinden des Grundzustands eines physikalischen Systems durch sorgfältiges Abkühlen [Kirk83]. Im SA-Algorithmus wird eine Zufallsfolge von Zuständen in Abhängigkeit von der Güte des vorhergehenden Zustands besucht. Es handelt sich dabei um einen Metropolisalgorithmus mit variabler Temperatur: Ist, ausgehend von einem gegebenen Zustand, ein zufällig gewählter Nachbarzustand besser als der alte, wird er in jedem Falle akzeptiert. Stellt er dagegen eine Verschlechterung dar, wird er nur mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit akzeptiert. Dies ermöglicht es, ein nur lokales Optimum, in dem das System sonst gefangen wäre, auch wieder zu verlassen. Der in der Akzeptanzfunktion auftretende Boltzmannfaktor enthält die Temperatur [Metr53]. Diese spielt nun die Rolle eines Kontrollparameters, der langsam abgesenkt wird.

Inzwischen ist SA eine etablierte universelle Methode, um optimale oder fast optimale Lösungen in komplexen und schwierigen Optimierungsaufgaben (NP-harte Probleme) aus sehr unterschiedlichen Bereichen zu finden. Vorzugeben sind nur die Nachbarschaftsrelation (Move-Class), um einen neuen Zustand zu generieren, und die Zielfunktion, die zu optimieren ist.

Um Simulated Annealing (oder auch Threshold Accepting) erfolgreich einzusetzen, ist die optimale Wahl der Abkühlfunktion von entscheidender Bedeutung. Eine besonders vielversprechende Basis bietet dabei der Ensemblezugang zum Simulated Annealing (EBSA), bei dem nicht ein einzelnes System sondern eine ganze Reihe von Kopien des Systems parallel abgekühlt werden. Dies gestattet es, bereits während des Abkühlens Informationen über die Natur des Systems zu gewinnen, die z.B. in die adaptive optimale Steuerung der Abkühlfunktion (oder auch der Move-Class) einfließen können. Dieser Algorithmus kann sehr effektiv auf Parallelrechnern implementiert werden.

Das Teilprojekt hat zum Ziel, für SA und TA
– die adaptive Steuerung der Abkühlfunktion sowie
– die Move Class zu verbessern,
– populationsdynamische Elemente in die Algorithmen aufzunehmen und
– einen Zusammenhang zwischen Zustandsraumstruktur und Effektivität des Algorithmus aufzustellen.

Dabei können Ergebnisse nur durch die Behandlung konkreter Optimierungsprobleme erzielt werden. Es wurden Untersuchungen durchgeführt an
— Travelling Salesman Problemen (TSP),
— Atomaren Clustern,
— amorphen Kohlenstoffsystemen,
— thermodynamischen Prozeßführungen,
— mechatronischen Systemen,
— einfachen Zustandsraummodellen.

Zudem hatte die Untersuchung dieser konkreten Probleme den Vorteil, daß die Mitarbeiter der neu aufzubauenden Arbeitsgruppe auf einfache Weise an die Probleme herangeführt werden konnten.

## 2.3 Forschungsaufgaben/Methoden

### 2.3.1 Teilaufgabe Methoden der parallelen Implementierung

Als Grundlage zur Bearbeitung der oben genannten Teilaufgaben mußten zunächst effektive parallele Implementierungen [Gree90] von SA [Metr53, Kirk83] und TA [Duec90, Duec93] geschaffen werden. Die wichtigen Fragen hierbei waren die erzielbaren Speed-up's sowie die dahinterliegenden Kommunikationsprozesse und ihre optimale Gestaltung. Hier gab es starke gemeinsame Interessen mit Prof. Rehm (Teilprojekt B2). Es wurden sowohl systemspezifische (z.B. Parix) als auch plattformunabhängige Softwarepakete [Mpi, Mpich] genutzt.

### 2.3.2 Teilaufgabe Adaptive Schedules

Zur Untersuchung der Frage, welche Eigenschaften optimale Abkühlfunktionen haben [Hoff90a] und wie Abkühlfunktionen adaptiv gesteuert werden können [Mari96], wurden verschiedene Systeme benutzt.

Bei der Kühlung atomarer Cluster ergab sich die Frage, wie durch optimale Steuerung erreicht werden kann, daß sich das System mit großer Wahrscheinlichkeit in seinem Grundzustand befindet.

Bei der Kühlung von amorphem Kohlenstoff wird mittels molekulardynamischer Verfahren, die quantenmechanische Wechselwirkungen berücksichtigen, versucht, energetisch möglichst tiefliegende Zustände zu erhalten [Frau95]. Hierbei ist z.B. die Anzahl der verschiedenen Ringe mit unterschiedlicher Atomzahl von großem Interesse [Mark96]. Und schließlich wurden für TA erste Untersuchungen an einem Barrierenmodell zur Bestimmung optimaler Abkühlfunktionen durchgeführt. Parallelcomputer wurden bisher auf diesem Gebiet nur im Zusammenhang mit einfachen empirischen Potentialmodellen eingesetzt [Cann96].

### 2.3.3 Teilaufgabe Verbesserung der Move-Class

Die Move-Class gibt vor, wie aus dem momentanen Zustand ein neuer Zustand gewonnen wird, dessen Güte untersucht werden soll. Im allgemeinen gibt es mehrere Möglichkeiten, für ein gegebenes Problem eine Move-Class zu definieren. Hier besteht die Frage, wie eine solche Wahl getroffen werden kann. Untersuchungen zur Move Class Verbesserung wurden an TSP-Problemen durchgeführt, bei denen Besonderheiten der Problemstruktur ausgenutzt wurden [Lin94, Schn98]. Darüberhinaus wurden für die Optimierung von thermodynamischen Prozeßführungen [Beja96] bei Dieselmotoren eine Move-Class für den Einsatz in kontinuierlichen Problemen entwickelt. Und schließlich wurde ein ähnliches Verfahren auch zur Optimierung des Anlaufverhaltens einer Induktionsmaschine (mechatronisches Problem) benutzt.

### 2.3.4 Teilaufgabe Einbeziehung von Populationsdynamik

Der letzte Hauptaspekt schließlich betrifft die Weiterentwicklung des Ensemble-Ansatzes [Hoff90b, Rupp91] hin zu Population Based Simulated Annealing (PBSA) durch Einbeziehung populationsdynamischer Elemente [Ebel90] in die Ensembleformulierung. Dabei werden Teile des Ensembles nach einer gewissen Zeit des Abkühlens gezielt verändert. Durch den parallelen Aufbau und die vielseitigen Kommunikationsmöglichkeiten sollte das Verfahren mit evolutionären Strategien verbessert und die Konvergenz beschleunigt werden. Untersuchungen wurden sowohl für TSP als auch für die Kühlung amorpher Kohlenstoffe durchgeführt.

## Literaturverzeichnis zu 2.3

[Metr53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller and E. Teller, Equation of State Calculations by Fast Computing Machines, J. Chem. Phys. **21**, 1087 (1953).

[Kirk83] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr. and M. P. Vecchi, Optimization by Simulated Annealing, Science **220**, 671 (1983).

[Gree90] D. R. Greening, Parallel Simulated Annealing Techniques, Physica D **42** 293 (1990).

[Ebel90] W. Ebeling, A. Engel and R. Feistel, Physik der Evolutionsprozesse (Akademie-Verlag, Berlin, 1990)

[Duec90] G. Dueck and T. Scheuer, Threshold Accepting: A General Purpose Optimization Algorithm Appearing Superior to Simulated Annealing, J. Comput. Phys. **90**, 161 (1990).

[Hoff90a] K. H. Hoffmann and P. Salamon, The Optimal Simulated Annealing Schedule for a Simple Model, J. Phys. A : Math. Gen. **23**, 3511 (1990).

[Hoff90b] K. H. Hoffmann, P. Sibani, J. M. Pedersen and P. Salamon, Optimal Ensemble Size for Parallel Implementations of Simulated Annealing, Appl. Math. Lett. **3**, 53 (1990).

[Rupp91] G. Ruppeiner, J. M. Pedersen and P. Salamon, Ensemble Approach to Simulated Annealing, J. Physique I **1**, 455 (1991).

[Hoff91] K. H. Hoffmann, D. Würtz, C. de Groot and M. Hanf, Concepts in Optimizing Simulated Annealing Schedules: An Adaptive Approach for Parallel and Vector Machines, in Parallel and Distributed Optimization, M. Grauer and D. B. Pressmar ed. (Springer-Verlag, Heidelberg, 1991), 154.

[NuRe92] Numerical Recipes, Cambridge University Press, Cambridge, 1992.

[Duec93] G. Dueck, New Optimization Heuristics: The Great Deluge Algorithm and Record-to-Record Travel, J. Comput. Phys. **104**, 86 (1993).

[Lin94] S. C. Lin, H. C. Hsueh, Nearest-neighbour heuristics in accelerated algorithms of optimization problems, Physica A **203**, 369 (1994).

[Frau95] T. Frauenheim, G. Jungnickel, T. Köhler, and U.Stephan, J. Non-Cryst. Sol. **182**, 186 (1995).

[Schn98] J. Schneider, C. Froschhammer, I. Morgenstern, T. Husslein, J. M. Singer, Searching for backbones – an efficient parallel algorithm for the travelling salesman problem, Comp. Phys. Comm. **96**, 173 (1996)

[Mari96] F. P. Marin, New monitoring parameter for the travelling salesman problem, Phys. Rev. Lett. **77**, 5149 (1996).

[Mend96] R. A. Mendez, A. Valladares, J. Flores, T. H. Seligman, O. Bohigas, Universal fluctuations of quasi-optimal paths of the travelling salesman problem, Physica A **232**, 554 (1996).

[Mark96] N. A. Marks, D. R. McKenzie, B. A. Pailthorpe, M. Bernasconi, M. Parinello, Microscopic Structure of Tetrahedral Amorphous Carbon, Phys. Rev. Lett. **76**, 768 (1996).

[Cann96] A. Canning, G. Galli, F. Mauri, A. de Vita, R. Car, O(N) tight-binding molecular dynamics on massively parallel computers: an orbital decomposition approach, Computer Physics Comm. **94**, 89 (1996).

[Beja96] A. Bejan, Entropy generation minimization: The new thermodynamics of finite-size devices and finite-time processes, Journal Appl. Phys. **79**, 1191 (1996).

[Meer97] S. Meeran, A. Shafie, Optimum path planning using convex hull and local search heuristic algorithms, Mechatronics **7**, 737 (1997).

[Mpi] Message passing interface (mpi) standard, `http://www.mpi-forum.org`.

[Mpich] Mpich homepage, `http://www.mcs.anl.gov/mpi/mpich/`.

## 2.4 Ergebnisse

### 2.4.1 Teilaufgabe Methoden der parallelen Implementierung

Es wurde eine universelle parallele Implementierung stochastischer Optimierung mittels SA/TA erstellt. Durch die Verwendung der Parallelverarbeitungsbibliothek MPI [Mpi, Mpich] kann das Program auf verschiedenen Rechnern vom einzelnen Linux-PC bis zur Cray T3E mit 128 und mehr Prozessoren ausgeführt werden. Für Workstation-Cluster wurde ein Load-Balancing Algorithmus entwickelt [Fach97] und implementiert, der auch auf sehr heterogenen Clustern und unter wechselnder Last die Rechner sehr gut ausnutzt. In der erstellten Implementierung können über eine Konfigurationsdatei verschiedene Schedules, Ensemblegrößen, Endbedingungen etc. flexibel eingestellt werden.

In diesem Zusammenhang muß festgestellt werden, daß der über den Erstantrag des SFBs beschaffte Parsytec Power/Xplorer4 dem heutigen Stand der Technik nicht mehr entspricht. Später beschaffte PentiumPro200–Computer zeigen für die verwendete Implementierung eine ca. dreifache integer Rechenleistung (Abbildung 2.1), ohne daß die Netzwerksgeschwindigkeit bei sinnvollen Nachrichtengrößen deutlich unter der des Xplorer liegt [Fach97]. Mit heute handelsüblichen Pentium II mit 300 MHz und 100 MBit Ethernet sollte eine weitere Steigerung der Rechengeschwindigkeit um den Faktor 1.5 zu günstigeren Preisen möglich sein.

Ergänzend wurde untersucht, wie sich die Kommunikationszeiten des Ensemble-Based Simulated Annealing sinnvoller nutzen lassen. Dazu wurde der Code von synchronen globalen Kommunikationsroutinen (Broadcast, Gather) auf non-blocking, asynchrone Send- und Receiveroutinen umgestellt. Für den Austausch der statistischen Daten wird dann eine Kommunikation im Hintergrund aufgesetzt. Bis dieser Austausch beendet ist, wird mit einem aus den lokalen Ensemblemitgliedern geschätzten Schedule weitergearbeitet (Abbildung 2.2).

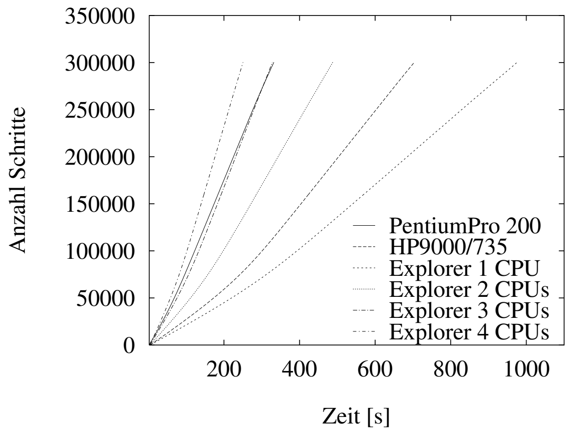


Abbildung 2.1: Ausführungsgeschwindigkeiten des gleichen Travelling Salesman Problems auf dem Power Explorer mit verschiedener Anzahl Prozessoren, einer HP9000/735 und einem PentiumPro200.

Die Kommunikationszeiten wurden stark verringert, doch leider stiegen im gleichen Maße Zeiten für das Berechnen der Optimierungsschritte an. Dies deutet darauf hin, daß in der verwendeten Implementierung von MPI [Mpich] die asynchrone Kommunikation in einen Hintergrundtask gelegt wird, der die entsprechende Zeit dann von dem berechnenden Task abzieht (Abbildung 2.3). In diesem Zusammenhang muß unbedingt, in Zusammenarbeit mit der Informatik, untersucht werden, ob nicht durch geeignete Rechner– und Netzwerkarchitektur der Nachteil dieser Kommunikationszeiten verringert werden kann.

Einer der Mitarbeiter (A. Fachat) besuchte im Rahmen des EU TRACS Programmes (Training and Research on Advanced Computer Systems) einen fünfwöchigen Trainingskurs des Edinburgh Parallel Computing Center. Der Kurs behandelte die Parallelisierung von verschieden gearteten Problemen unter MPI und High Performance Fortran, mit der Möglichkeit der Nutzung der dortigen Cray T3D und T3E. Oben genannte Probleme konnten dadurch auch auf der Cray T3D mit ihren sehr effektiven Kommunikationsbibliotheken getestet werden. Die gewonnenen Erfahrungen wurden innerhalb der Gruppe durch Vorträge, Gespräche sowie Kursunterlagen weitergegeben.

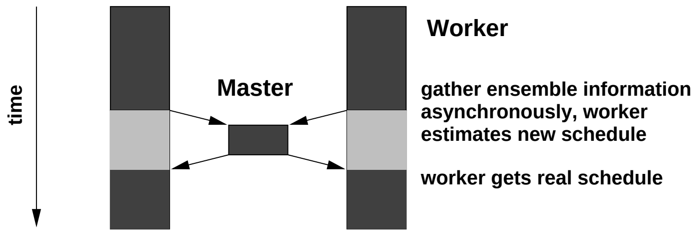


Abbildung 2.2: Nutzung der Kommunikationszeit durch asynchrone Kommunikation und lokale Schätzung des Schedules durch die Prozessoren.

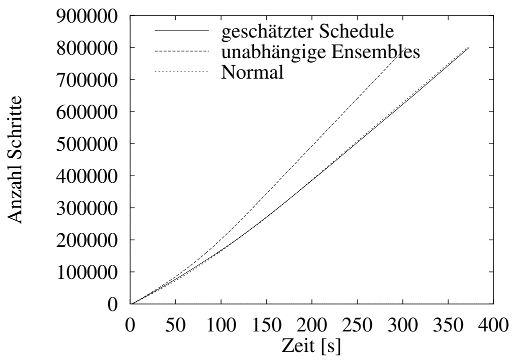


Abbildung 2.3: Optimierungsschritte pro Zeit für einen Workstation-Cluster. Zu sehen sind drei Kurven für reines Ensemble-Based Simulated Annealing (normal), EBSA mit geschätztem Schedule während der Kommunikation sowie mit mehreren kleineren unabhängigen Ensembles.

## 2.4.2 Teilaufgabe Adaptive Schedules

**Kühlen atomarer Cluster**

In dieser Anwendung bestand die Aufgabe darin, die Kühlfunktion zu finden, die mit größter Wahrscheinlichkeit das absolute Minimum der potentiellen Energie eines $Ar_{19}$-Clusters ergibt. Eine repräsentative statistische Auswahl von energetischen Minima sowie alle Potentialschwellen zwischen diesen Minima sind bekannt. Das Modellsystem ist nicht zu groß, um mit einem Variationsverfahren den absolut optimalen Schedule für ein Simulated Annealing in vorgegebener Zeit zu finden. Es eignet sich deshalb für den Test anderer Optimierungsverfahren, die ihrerseits für bedeutend größere Systeme geeignet sind [Kunz98]. Abbildung 2.4 zeigt an einem

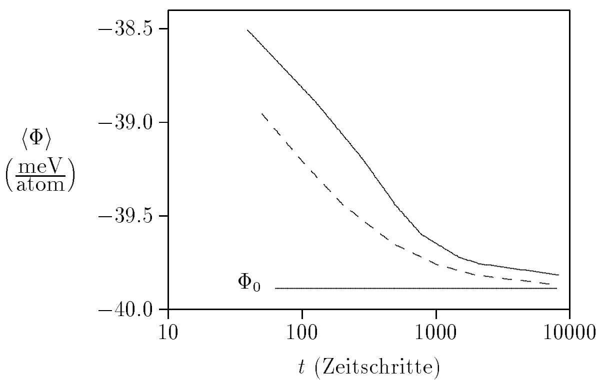


Abbildung 2.4: Potentielle Energie am Ende der Abkühlung, $\langle\Phi\rangle$, als Funktion der Abkühlzeit $t$ für den adaptiven Schedule (volle Linie) und den optimalen Schedule (Strichlinie).

Beispiel für einen adaptiven Schedule die nach verschiedenen Annealing-Zeiten erreichte mittlere Energie eines Ensembles im Vergleich mit der Grundzustandsenergie $\Phi_0$ sowie mit der durch optimales Annealing erreichbaren mittleren Energie. Es ist vor allem interessant, daß die Differenz der potentiellen Energien beider Schedules mit größerer Abkühlzeit deutlich verringert wird. Dies läßt den Schluß zu, daß dies auch bei der Anwendung der gefundenen adaptiven Schedules auf wesentlich größere Systeme der Fall ist, so daß diese Anwendung für genügend große Abkühlzeiten empfohlen werden kann, auch wenn aufgrund der Größe des Systems kein absolut optimaler Schedule bekannt ist.

Diese Arbeiten sind zusammen mit R.S. Berry von der University of Chigaco und R. Kunz (TU Berlin) durchgeführt worden, detaillierte Ergebnisse befinden sich in [Kunz98].

**Abkühlen von amorphem Kohlenstoff**

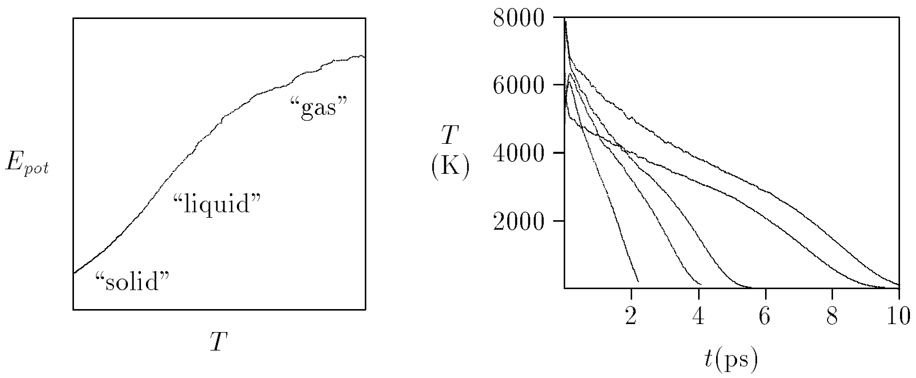


Abbildung 2.5: Mittlere potentielle Energie als Funktion der Temperatur und einige aus linearer Energieabsenkung gewonnene Schedules

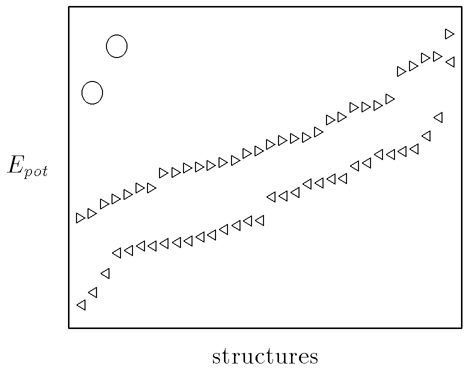


Abbildung 2.6: Potentielle Energien pro Atom für verschiedene Strukturen. Ensembles mit je 128 Atomen: 2.12 ps Abkühlzeit ($\triangleright$), 5.77 ps Abkühlzeit ($\triangleleft$). Einzelstrukturen aus früheren Arbeiten [Frau95]: 2 ps und 8 ps Abkühlzeit ($\bigcirc$).

Im Falle des Simulated Annealing von atomaren Strukturen fällt die typische Abhängigkeit der Potentiellen Energie von der Temperatur auf. Obwohl bei amorphen Substanzen kein Phasenübergang 1. Ordnung zu beobachten ist, steigt die potentielle Energie im flüssigen Zustand bei Erwärmung am stärksten. Dies ist auf die Vielzahl der Umordnungsprozesse bei dieser Temperatur zurückzuführen. Aus Abbildung 2.5 ist ein charakteristischer Verlauf der potentiellen Energie ersichtlich. Führt man mit diesen Systemen Simulated Annealing durch, ist es darum folgerichtig, im Temperaturbereich des flüssigen Zustandes besonders langsam und sorgfältig abzukühlen. Dies wird dadurch erreicht, daß während der Abkühlung die

Ableitung des Ensemble-Mittelwertes der potentiellen Energie $\overline{E_{pot}}(T)$ konstant gehalten wird. Die parallele Bearbeitung eines Ensembles von Strukturen ermöglicht die Benutzung von $\overline{E_{pot}}(T)$ als Steuerparameter. Dieser adaptive Schedule wurde erfolgreich für das Simulated Annealing von Systemen aus amorphem Kohlenstoff eingesetzt [Blau98]. Im rechten Teil der Abbildung 2.5 sind einige auf diese Weise entstandenen Abkühlfunktionen dargestellt. Es wurden jeweils 32 Systeme parallel verarbeitet. Aus Abbildung 2.6 ist zu erkennen, daß jeweils fast alle Mitglieder des Ensembles durch die neue Abkühlvorschrift ein tieferliegendes Minimum der potentiellen Energie erreicht haben als die besten Einzelsysteme gleicher Größe und vergleichbarer Abkühlzeit. Damit konnten bisher erzielte Ergebnisse [Frau95] deutlich verbessert werden.

Keine auf der Quantenphysik basierende Computersimulation molekulardynamischer Prozesse erlaubt ein Simulated Annealing mit in der Natur normalerweise auftretenden Abkühlgeschwindigkeiten, auch nicht auf den heute leistungsfähigsten Computern. Das Auffinden tiefliegender Minima der potentiellen Energie hat daher besondere Bedeutung für die Modellierung realistischer Systeme. Die hier gefundenen Modellsysteme sind unentbehrlich für die Strukturanalyse und die Voraussage der Systemeigenschaften [Jung96].

### 2.4.3 Teilaufgabe Verbesserung der Move-Class

**Travelling Salesman**

Es wurde untersucht [Moeb97], inwieweit sich die Performance verändert, wenn man in einem TSP einen abgewandelten Optimierungsschritt durchführt, d.h. die Move-Class verändert. Bei dem üblichen sogenannten *lin-2-opt* Optmierungsschritt wird ein Teil der Tour das Travelling Salesman herausgetrennt und in der umgekehrten Richtung wieder eingefügt (Abbildung 2.7).

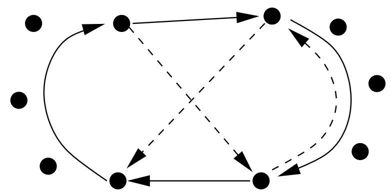

Abbildung 2.7: Der Lin-2-Opt Move-Class Schritt beim TSP. Die durchgezogene Tour ist die ursprüngliche Tour, während die gestrichelte Tour die Änderung darstellt.

Untersucht wurde nun, inwieweit es sich auswirkt, wenn man eine der bei diesem Schritt neu entstehenden Verbindungen in der Hinsicht optimiert, daß man (siehe Abbildung) für die Stadt rechts unten nur einen der nächsten Nachbarn der Stadt links oben in der Abbildung zuläßt. Dieser veränderte Schritt führte zu einer deutlich schnelleren Konvergenz. Desweiteren wurde untersucht, wie es sich auswirkt wenn man eine Stadt aus der Tour herausnimmt und in der Tour hinter einen ihrer nächsten Nachbarn schiebt. Auch dies ergab eine bessere Konvergenz des Algorithmus. Beide Methoden haben jedoch den Nachteil, daß zusätzliche Tabellen der nächsten Nachbarn erstellt werden müssen.

Zusätzlich wurden Vergleichsrechnungen mit einem von A. Möbius vorgeschlagenem Verfahren durchgeführt, die schließlich in eine gemeinsame Veröffentlichung [Moeb97] eingingen.

**Thermodynamische Prozeßsteuerung**

Ein weiteres Beispiel zur Fragestellung der Move-Class ist die Optimierung der Kolbenbewegung eines Dieselmotors. Die traditionelle, annähernd harmonische Bewegung des Kolbens soll so optimiert werden, daß sich der beste Wirkungsgrad ergibt [Hoff97a]. Dabei ist jedoch zu berücksichtigen, daß die Beschleunigung des Kolbens eine gewisse obere Grenze nicht überschreiten kann. Dazu variiert man

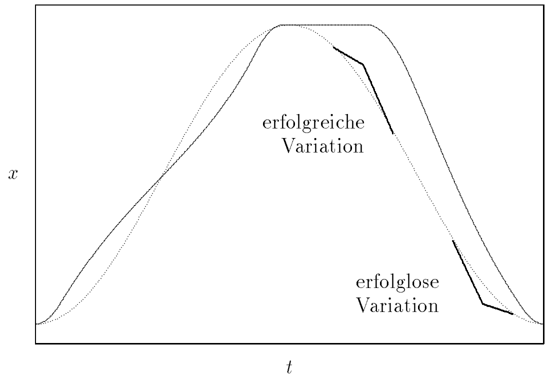


Abbildung 2.8: Statistische Optimierung der Kolbenbewegung. Zu optimierende Funktion (Punktlinie), optimale Funktion (durchgehende Linie).

die diskretisierte Funktion $x(t)$ der Kolbenbewegung, indem eines der $x$ unter Steuerung einer Zufallszahl verändert wird, wie dies in Abbildung 2.8 illustriert ist. Es werden nur solche Variationen zugelassen, die sämtliche Nebenbedingungen für die Funktion $x(t)$ erfüllen. Da mehrere solcher Variationen gleichzeitig untersucht werden können, ist das Verfahren ideal für die parallele Implementierung geeignet [Burz98]. Wichtigstes und überraschendes Ergebnis ist, daß sich der Wirkungsgrad des Motors auf diese Weise um annähernd 10 % verbessern läßt.

In diesem Zusammenhang gibt es eine (von der EU unterstützte) Zusammenarbeit mit A. Tsirlin und S. Amelkin von der Universität Pereslavl, bei der weitere thermodynamische Systeme (Wärmetauscher, Systeme mit mehr als zwei Wärmebädern, Separationsprozesse, optimaler Wärmeübergang bei polytropen Prozessen) einer Prozeßoptimierung unterzogen werden.

**Mechatronische Systeme**

Ein weiteres interessantes Beispiel für eine Verbesserung der Move–Class ist die Optimierung des Anlaufverhaltens einer Induktionsmaschine (siehe Abb.2.9). Die Zielfunktion, deren Minimum ein möglichst gutes Anlaufen beschreibt, ist hier ein Funktional der Spannungen ($V_{s1}$ und $V_{s2}$) und der Kreisfrequenzen ($\omega_{s1}$ und $\omega_{s2}$) am Stator ($V_{50} = V_{s1} \cos \omega_{s1} t$, $V_{60} = V_{s2} \cos \omega_{s2} t$). Abbildung 2.10 zeigt die Gestalt der Zielfunktion für konstante Spannungen als Funktion der Kreifrequenzen. Hieraus ist ersichtlich, daß selbst für konstante Spannungen die Zielfunktion eine sehr komplexe Gestalt aufweist.

Bisher wurde ein Nachbarzustand gewöhnlich aufgefunden, indem man um den

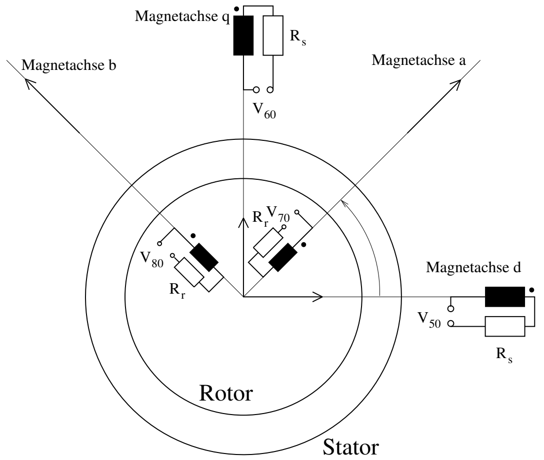


Abbildung 2.9: Induktionsmaschine

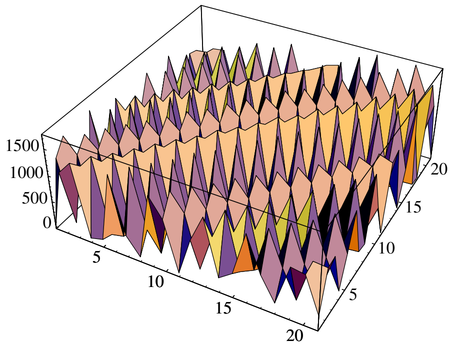


Abbildung 2.10: Zielfunktion in Abhängigkeit von $\omega_{s1}$ (linke Abszisse) und $\omega_{s2}$ (rechte Abszisse). $X$ Abszisseneinheiten entsprechen $18 + (X - 1) \cdot 0.2\,\mathrm{s}^{-1}$. Die Werte der anderen Parameter waren: $V_{100} = V_{200} = 20\,\mathrm{V}$.

gegebenen Zustand einen Radius schlug und innerhalb dieses Bereiches einen neuen Zustand nach einer Gleichverteilung auswürfelte. Diese Vorgehensweise hat den Nachteil, daß die Effizienz des Verfahrens stark von der Wahl des Radius abhängt.

Zur weiteren Verbesserung des Verfahrens wurde daher eine modifizierte Variante des Downhill–Simplex–Verfahrens eingesetzt. Hierbei wird im Konfigurationsraum ein Simplex aufgespannt. Ein neuer Simplex wird dann vermöge der drei Operationen Spiegelung, Expansion und Kontraktion aus dem alten Simplex gewonnen. Um das Simulated–Annealing–Verfahren anwenden zu können, wird der neue Simplex um eine stochastische Komponente erweitert, in dem man zu seinen Koordinaten thermisch verteilte Zufallszahlen addiert [NuRe92].

Dieses verbesserte Verfahren wurde von uns in einen Ensemble Based Simulated Annealing Algorithmus eingefügt und schließlich in ein paralleles Programm mit dynamischem Lastenausgleich implementiert. Für die Induktionsmaschine liegen jetzt erste Ergebnisse vor, die auch im Rahmen einer Zusammenarbeit mit dem Institut für Mechatronik von Interesse sind.

**Atom-Cluster**

Auf die gleiche Weise konnte der Grundzustand eines aus 13 Atomen bestehenden Lennard–Jones–Clusters bestimmt werden. Die Atome des Clusters bilden im Grundzustand einen Ikosaeder. Obwohl dieser Cluster mit 13 Atomen noch relativ klein ist, weist er dennoch mindestens 988 relative Potentialminima auf. Äußerst erfolgversprechend für Anwendungen der Move–Class auf größere Cluster ist die Tatsache, daß das statistische Optimierungsverfahren in der Lage war, unabhängig vom Anfangszustand stets das globale Minimum der potentiellen Energie zu finden.

### 2.4.4 Teilaufgabe Einbeziehung von Populationsdynamik

**Travelling Salesman**

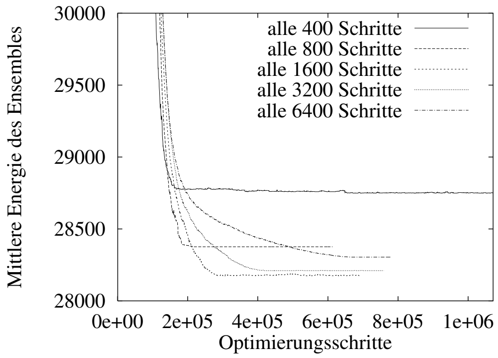


Abbildung 2.11: Mittlere Energie des Ensembles für verschiedene Abstände zwischen den Austauschschritten.

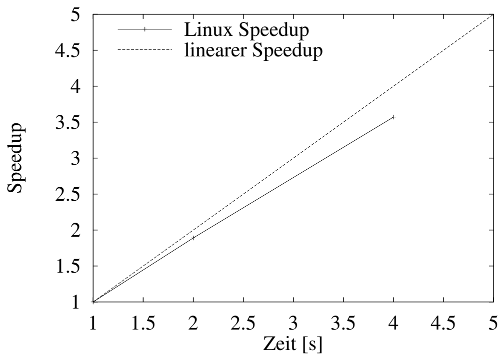


Abbildung 2.12: Speedup bei Einbeziehung von Populationsdynamik.

Ein Ensemble-Based Simulated Annealing Code wurde so abgewandelt, daß eine Populationsdynamik einbezogen wurde. In regelmäßigen Abständen wurde eine Selektion dergestalt durchgeführt, daß einige der schlechtesten Ensemblemitglieder durch eine gleiche Anzahl von Kopien der besten Ensemblemitglieder ersetzt werden. Die Anzahl der Selektionsschritte und die Anzahl der ersetzten Ensemblemitglieder wurde variiert. Dabei zeigt sich, daß eine solche Ersetzung nicht zu häufig durchgeführt werden darf, siehe Abbildung 2.12. Insgesamt ergibt sich aber für die untersuchten TSP-Probleme eine deutliche Verbesserung der Ergebnisse.

**Amorpher Kohlenstoff**

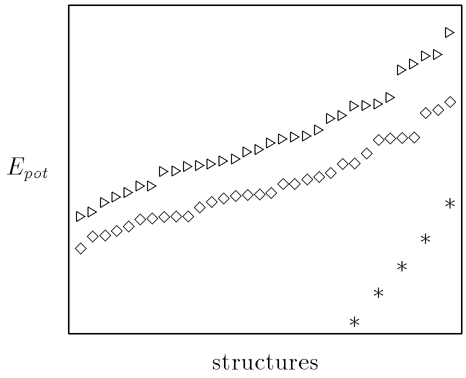


Abbildung 2.13: Potentielle Energien pro Atom für verschiedene Strukturen. Ensembles mit je 128 Atomen: 2.12 ps Abkühlzeit ($\triangleright$), 4.08 ps Abkühlzeit ($\diamond$). Durch Mutation und Selektion gewonnene Einzelstrukturen: 2.55 ps Abkühlzeit ($*$).

Im Falle des Simulated Annealing von amorphen Kohlenstoffstrukturen wurde Mutation und Selektion in der Weise angewandt, daß etwa 50 Mal während der Abkühlung das jeweils energetisch schlechteste System durch eine Mutation (Umkehr der Geschwindigkeiten der Atome) des jeweils besten Systems ersetzt wurde. Nach vollständiger Abkühlung wurde das beste System mit den Ensembles ohne Populationsdynamik verglichen. Aus Abbildung 2.13 ist zu erkennen daß auf diese Weise jeweils energetisch ausgewählt tiefliegende Strukturen gewonnen werden konnten. Die aufwendige LDA-basierende Molekulardynamik nimmt für eine derartige Berechnung auf dem Parsytec-GCPP mehrere Wochen in Anspruch. Deshalb konnte keine weitere Optimierung des Verfahrens erfolgen. Dennoch wurde sofort mit den neuen Rechnungen erreicht, daß die Mehrheit dieser Strukturen eine potentielle Energie besitzt, die sogar tiefer liegt als die Energie der besten Strukturen, die mit längerer Abkühlzeit aber ohne Selektion entstanden sind. Die hierbei entstandenen Strukturen sind für die Arbeiten im Gebiet der amorphen Kohlenstoffe von großem Interesse; in Zusammenarbeit mit der Arbeitsgruppe von Th. Frauenheim werden die Ergebnisse demnächst veröffentlicht.

## Literaturverzeichnis zu 2.4

### Eigene referierte Publikationen

[Hoff96a] K. H. Hoffmann, M. Schreiber, eds., Computational Physics, Springer-Verlag Heidelberg 1996.

[Hoff96b] K. H. Hoffmann, Metastable Systems and Stochastic Optimization in: Computational Physics, eds. K. H. Hoffmann, M. Schreiber, Springer-Verlag Heidelberg 1996.

[Jung96] G. Jungnickel, Th. Köhler, Th. Frauenheim, M. Haase, P. Blaudeck, U. Stephan, Structure and chemical bonding in amorphous diamond, Diamond and Related Materials **5**, 175 (1996).

[Hoff97a] K. H. Hoffmann, J. Burzler, S. Schubert, Endoreversible Systems, J. Non-Equilibrium Thermodyn. **22**, 4 (1997)

[Moeb97] A. Möbius, A. Neklioudov, A. Díaz-Sánchez, K. H. Hoffmann, A. Fachat, M. Schreiber, Optimization by thermal cycling, Phys. Rev. Lett. **79**, 4297 (1997).

[Fach97] A. Fachat, K. H. Hoffmann, Implementation of ensemble based simulated annealing with dynamic load balancing under mpi, Comp. Phys. Comm. **107**, 49 (1997).

[Kunz98] R. E. Kunz, P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, R. S. Berry, Atomic clusters and nanoscale particles: From coarse-grained dunamics to optimized annealing schedules, J. Chem. Phys. **108**, 1 (1998).

[Burz98] J. Burzler, P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, Optimized Internal Combustion Engines, S. Sienuitycz and A. De Vos, eds., Springer-Verlag (1998).

[Tafe98] R. Tafelmayer, K. H. Hoffmann, Adaptive schedules for ensemble based threshold accepting, accepted by Applied Mathematics Letters.

**Zur Publikation eingereicht:**

[Blau98] P. Blaudeck, K. H. Hoffmann, G. Jungnickel, T. Köhler, Frauenheim, T.: Ensemble Based Adaptive Schedules for Parallel Simulated Annealing: Application to Amorphous Carbon, submitted.

**Andere Zitate: Siehe Literaturverzeichnis zu 2.3**

## 2.5 Offene Fragen/Ausblick

Die Anforderungen an die gerätetechnische Ausstattung und die zur Verfügung stehende Computerleistung ist bei einigen Teilaufgaben besonders hoch und kann mit den speziell für diese Teilaufgaben zur Verfügung gestellten Mitteln nicht voll befriedigend werden. Aus diesem Grund sind weitere Untersuchungen notwendig, wie die benutzten parallelen Algorithmen auf heterogenenen Computernetzwerken unter Verwendung von automatischer Lastverteilungs-Software effektiv implementiert werden können. Dann wird eine optimale gleichzeitige Nutzung sowohl neuer als auch bereits vorhandener Computerkapazität möglich sein.

Bei der Anwendung der Opimierungsverfahren steht die Modifizierung und Adaption auf kompliziertere reale Systeme von praktischem Interesse im Vordergrund. Dabei müssen Schedules, Move–Class und Elemente der Populationsdynamik im einzelnen systematisch verglichen und ausgewählt werden. Einzelheiten des geplanten weiteren Vorgehens sind ausführlich im Verlängerungsantrag dieses SFB-Teilprojektes für die Jahre 1999 bis 2001 dargelegt.