

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
Dr. S. Schubert, Computerphysik
Dr. A. Fachat, Computerphysik
Dr. B. Heide, Computerphysik
Dipl.-Phys. J. Burzler, Computerphysik
Dr. S. Amelkin, Computerphysik
Dr. A. Franz, Computerphysik

2.2 Ausgangsfragestellung/Einleitung

Gegenstand dieses Teilprojektes war die parallele Implementierung stochastischer Optimierungsverfahren, insbesondere des Simulated Annealing (SA), mit verschiedenen Akzeptanzwahrscheinlichkeiten (Metropolis, Tsallis, Threshold Accepting). 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.

Um Simulated Annealing 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 Steue-

zung der Abkühlfunktion (oder auch der Move Class) einfließen können. Dieser Algorithmus kann sehr effektiv auf Parallelrechnern implementiert werden.

Das Teilprojekt hatte zum Ziel, für Simulated Annealing

- die Move Class sowie
- die adaptive Steuerung der Abkühlfunktion zu verbessern,
- optimale Abkühlfunktionen zu finden,
- den Einfluß anderer Akzeptanzregeln zu untersuchen,
- 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,
- thermodynamischen Prozeßführungen,
- mechatronischen Systemen,
- einfachen Zustandsraummodellen.

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, Duec90, Duec93] geschaffen werden. Die wichtigen Fragen hierbei waren die erzielbaren Speed-up's sowie die dahinterliegenden Kommunikationsprozesse und ihre optimale Gestaltung.

2.3.2 Teilaufgabe Verbesserung der Move Class

Untersuchungen zur Move Class Verbesserung wurden an TSP-Problemen durchgeführt, bei denen Besonderheiten der Problemstruktur ausgenutzt wurden [Lin94, Schn96]. Darüberhinaus wurden für die Optimierung von thermodynamischen Prozeßführungen [Beja96] bei Dieselmotoren eine Move Class für den Einsatz in kontinuierlichen Problemen entwickelt.

2.3.3 Teilaufgabe Optimale und adaptive Schedules

Zur Untersuchung der Frage, welche Eigenschaften optimale Abkühlfunktionen haben [Hoff90a] und wie Abkühlfunktionen adaptiv gesteuert werden können [Mari96], wurden verschiedene Systeme benutzt. Für Threshold Accepting wurden erste Untersuchungen an einem Barrierenmodell zur Bestimmung optimaler Abkühlfunktionen durchgeführt.

2.3.4 Teilaufgabe Einbeziehung von Populationsdynamik

Der Ensemble-Ansatz [Hoff90b, Rupp91] wurde durch Einbeziehung populationsdynamischer Elemente [Ebel90] in die Ensembleformulierung weiterentwickelt.

Literaturverzeichnis

- [Metr53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller und E. Teller, Equation of state calculations by fast computing machines, *J. Chem. Phys.* **21**, 1087 (1953).
- [Kirk83] S. Kirkpatrick, C. D. Gelatt Jr. und 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 und R. Feistel, *Physik der Evolutionsprozesse* (Akademie-Verlag, Berlin, 1990)
- [Duec90] G. Dueck und T. Scheuer, Threshold Accepting: A general purpose optimization algorithm appearing superior to Simulated Annealing, *J. Comput. Phys.* **90**, 161 (1990).
- [Hoff90a] K. H. Hoffmann und 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 und P. Salamon, Optimal ensemble size for parallel implementations of Simulated Annealing, *Appl. Math. Lett.* **3**, 53 (1990).
- [Rupp91] G. Ruppeiner, J. M. Pedersen und P. Salamon, Ensemble approach to Simulated Annealing, *J. Physique I* **1**, 455 (1991).
- [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 und H. C. Hsueh, Nearest-neighbour heuristics in accelerated algorithms of optimization problems, *Physica A* **203**, 369 (1994).
- [Schn96] J. Schneider, C. Froschhammer, I. Morgenstern, T. Husslein und 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).
- [Beja96] A. Bejan, Entropy generation minimization: The new thermodynamics of finite-size devices and finite-time processes, *J. Appl. Phys.* **79**, 1191 (1996).

2.4 Ergebnisse

Wir haben bisher Arbeiten zu verschiedenen der oben genannten Fragestellungen durchgeführt [Hof99]. Gegenstand unserer Untersuchungen waren Fortentwicklungen des Simulated Annealing Algorithmus [MDSF99], der Ensemblezugang zum Threshold Accepting [TH99], die Bestimmung der Gleichgewichtsverteilung für Threshold Accepting [FHF00], und Vergleiche von Metropolis Algorithmus, Threshold Accepting und Tsallis Statistics basiertem Algorithmus [FH00b]. Schließlich haben wir für ein Anwendungsproblem ein besonders effektives Simulated Annealing basiertes Verfahren implementiert.

Im Bereich des Ensemblezugangs zum Simulated Annealing haben wir einen adaptiven Algorithmus vorgestellt [TH99], der es erlaubt, die Abkühlkurve, d.h. das Herunterfahren des Thresholds, an das Verhalten der Ensemblemitglieder anzupassen. Hierbei konnte gezeigt werden, dass unser parallel implementierter Algorithmus bessere Ergebnisse erzielt, als wenn man etwa die gesamten Rechnerressourcen in sequentieller Weise einsetzt.

Bei der Untersuchung des Threshold Accepting Algorithmus stellte sich die Frage, wie die Gleichgewichtsverteilung von der Energie abhängt. Dies ist für diese Akzeptanzregel nicht einfach zu beantworten, da das System keine detaillierte Balance besitzt. Es zeigte sich überraschenderweise [FHF00], dass sich eine angenäherte Exponentialverteilung als Gleichgewichtsverteilung ergibt.

In einer weiteren Arbeit konnten wir beim Vergleich von Threshold Accepting Algorithmus und Tsallis Statistics zeigen [FH00b], dass sich ersterer als Spezialfall des letzteren darstellen lässt. Damit ergeben sich natürlich Rationalisierungseffekte bei zukünftigen Arbeiten.

Für Tsallis Statistics bestimmten wir [FH00a] dann optimale Abkühlverfahren. Hier untersuchten wir insbesondere die Abhängigkeit von dem Parameter q , der in diesen Algorithmus eingeht. Dabei zeigte sich, dass immer der Limes $q \rightarrow -\infty$ zu den besten Ergebnissen führte.

Bei unseren Vergleichen der verschiedenen Algorithmen war uns immer wieder aufgefallen, dass Threshold Accepting die besten Ergebnisse erzielte. Es ist uns dann gelungen [FHS00], allgemein zu beweisen, dass Threshold Accepting in einer weiten Klasse von Algorithmen, die das klassische Simulated Annealing und auch die Tsallis Statistics enthält, der bestmögliche Algorithmus ist.

Schließlich entstanden optimierte Simulated Annealing Algorithmen zur Lösung eines Anwendungsproblems. Für die Optimierung der Prozeßführung bei Dieselmotoren gelang es, eine Moveclass zu implementieren, die universell an alle ingenieurtechnischen Nebenbedingungen angepaßt werden kann [HBB00].

Die laufenden Arbeiten an diesem Teilprojekt dauern an und werden zum Ende des Jahres 2001 beendet. Der ausführliche Abschlußbericht für das Teilprojekt wird dann mit den vollständigen Ergebnissen nachgereicht.

Literaturverzeichnis

Eigene referierte Publikationen

- [Hof99] K. H. Hoffmann. Slow relaxation dynamics from spin glasses to stochastic optimization. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):30–33, 1999.
- [MDSF99] A. Möbius, A. Díaz-Sánchez, B. Freisleben, M. Schreiber, A. Fachat, K.H. Hoffmann, P. Merz, and A. Nekliudov. Two physically motivated algorithms for combinatorial optimization: thermal cycling and iterative partial transcription. *Comp. Phys. Comm.*, 121-122(1-3):34–36, 1999.
- [TH99] R. Tafelmayer and K. H. Hoffmann. Adaptive schedules for ensemble-based threshold accepting. *Appl. Math. Lett.*, 12(5):131–135, 1999.
- [FHF00] A. Fachat, K.H. Hoffmann, and A. Franz. Simulated annealing with threshold accepting or tsallis statistics. *Comp. Phys. Comm.*, 132(3):232–240, 2000.
- [HBB00] K. H. Hoffmann, P. Blaudeck, and J. Burzler. Optimal Piston Paths for Diesel Engines, invited contribution to Thermodynamics of Energy Conservation and Transport. Springer Verlag New York, 2000

Zur Publikation eingereicht:

- [FH00a] Astrid Franz and Karl Heinz Hoffmann. Optimal annealing schedules for a modified Tsallis statistics. Submitted to *Journal of Computational Physics*, 2000.
- [FH00b] Astrid Franz and Karl Heinz Hoffmann. Threshold Accepting as limit case for a modified Tsallis statistics. Submitted to *Applied Mathematics Letters*, 2000.
- [FHS00] Astrid Franz, Karl Heinz Hoffmann, and Peter Salamon. Threshold accepting is the best possible strategy in simulated annealing. Submitted to *Physical Review Letters*, 2000.