

模拟退火算法的并行实现及其应用^{*}

李树有¹⁾²⁾ 都志辉³⁾ 吴梦月¹⁾⁴⁾ 朱 静¹⁾ 李三立³⁾

¹⁾ 清华大学材料科学与工程研究院电子显微镜实验室, 北京 100084)

²⁾ 国家教育部先进材料开放研究实验室, 北京 100084)

³⁾ 清华大学计算机科学与技术系, 北京 100084)

⁴⁾ 钢铁研究总院, 北京 100081)

(2001 年 2 月 12 日收到, 2001 年 3 月 12 日收到修改稿)

利用高性能并行超级计算机系统 THNPSC-1 成功地实现了模拟退火算法的并行运算, 并将其应用于会聚束电子衍射、俄歇电子能谱等实验数据的分析中, 取得了以往实验数据分析方法无法获得的定量数据. 整个模拟退火计算程序是一个独立的模块, 具有良好的可移植性, 适用于任何多变量函数的最优化问题.

关键词: 最优化, 会聚束电子衍射, 俄歇电子能谱

PACC: 0650, 6114, 6116D

1 引 言

模拟退火算法^[1]是一种求解多元函数全局最小值的方法. 这种算法可以有效地摆脱局部极小值, 以任意接近于 1 的概率达到全局最小值点, 因而不论在组合优化问题, 还是在连续空间优化问题上都有广泛的应用. 最近本文作者根据物理上应用的需要, 对模拟退火算法的搜索空间、降温规则及终止准则等进行了一些改进, 并将这种算法成功地用于会聚束电子衍射、俄歇电子能谱等实验数据的分析中, 取得了良好的计算结果^[2-4]. 而后, 为了进一步加快运算速度, 又将模拟退火程序改为并行程序. 利用清华大学计算机科学与技术系最近研制的高性能并行超级计算机系统 THNPSC-1 实现了网络并行计算. 实践证明并行计算比串行计算速度提高了 5—10 倍. 本文对上述工作进行了总结和讨论, 以期对该模拟退火程序的进一步推广应用提供基础.

2 运算环境 THNPSC-1 介绍

THNPSC-1 是一种基于互联网络的高性能超级计算机系统. 目前清华大学计算机科学与技术系已建立了两套含 8 个结点的互联网络计算系统, 一套

网络为 100M Ethernet, 另一套为自己设计研制的动态交叉开关网络 TH-SWITCH; 每个结点为 Dual Pentium III 500MHz CPU 的 SMP 系统. 采用的软件系统有 Linux Red Hat 5.1 操作系统, 核心版本为 2.0.34, MPI CH-1.1.1 并行计算环境, TH-GBNet 用户层通信接口及相应函数库.

3 对传统模拟退火算法的改进

3.1 引入“最大可能搜索范围”的概念

对于任何一个待测的物理量, 测量者或者根据经验, 或者根据粗略的测量结果, 总是对该物理量的可能范围有一个直观的估计. 例如透射电子显微镜样品的厚度为 10^1 — 10^2 nm. 这样对该物理量的优化计算就没有必要进行全空间搜索. 但另一方面如果严格规定了某一物理量的搜索范围, 人们又担心物理量的真实值不在给定的搜索范围内. 据此, 本文引入了“最大可能搜索范围”的概念. 算法以较大的概率搜索事先给定的初始搜索范围, 同时又有一定的概率搜索该范围之外的全空间. 这样既能保证算法有较高的效率, 又在一定程度上允许操作者给出错误的初始参数搜索范围.

3.2 逐渐缩小的自变量范围

在计算过程中, “最大可能搜索范围”是随着计

^{*} 国家自然科学基金(批准号 59895154)资助的课题.

算时间的延续而缓慢缩小的.这样既可以进一步地缩短运算时间,又可以在操作者给出错误的初始搜索范围时算法回到正确的搜索空间.

3.3 终止准则

任何一个物理量都有它自己的测量精确度,当“最大可能搜索范围”缩小到此测量精确度范围内时,就可以认为此物理量已经在这种精确度范围内被“精确地”测量了.与常规的目标函数值变化足够缓慢这一终止准则相比,以物理量精确度作为终止准则显然更符合实际,同时对于程序的使用者也更容易给出相应的数值.

3.4 算法的并行实现

本文采用的是单纯形-模拟退火算法,这种算法的原理决定了它很容易由串行改为并行.因为单纯形每一个顶点上的计算是独立的,所以只需将每一个顶点上的计算分配给不同的处理器,即可实现并行计算.例如对于一个变量数为 N 的最优化计算,采用 $N+1$ 个处理器的并行计算效率最高,因为单纯形有 $N+1$ 个顶点.如果不考虑并行时网络通信的开销,此时并行计算的时间将是串行计算的 $1/N+1$.

4 算法的数学模型测试

为了便于比较,选择了文献中已有的三个数学模型^[5]对改进后的程序进行了测试.这三个数学模型是

模型 a

$$f(x,y) = x^2 + 2y^2 - 0.3\cos(3\pi x) - 0.4\cos(4\pi y) + 0.7,$$
$$x \in [-100,100], \quad y \in [-100,100]; \quad (1)$$

模型 b

$$f(x,y) = g(x) + g(y),$$

其中

$$g(x) = \frac{1}{4}x^2 - \frac{1}{2}\cos(2\pi x) - \frac{1}{4}\cos\left(\frac{16\pi x}{x^2 + 0.5}\right) + \frac{3}{4},$$
$$x \in [-4,4], \quad y \in [-4,4]; \quad (2)$$

模型 c

$$f(x_1,x_2,x_3) = \frac{\pi}{3}\{10\sin^2(\pi x_1) + (x_1 - 1)^2$$
$$\cdot [1 + 10\sin^2(\pi x_2)] + (x_2 - 1)^2$$
$$\cdot [1 + 10\sin^2(\pi x_3)] + (x_3 - 1)^2\},$$
$$x_1 \in [-10,10], \quad x_2 \in [-10,10],$$
$$x_3 \in [-10,10]. \quad (3)$$

从这三个模型所对应的一维剖面图(图 1(a)–(c))可以看出,这三个函数在最小值附近均存在许多个局部极小点.对于这样的函数求最值,一般的极值计算方法无能为力,除非给定的初始值十分接近全局最小值点.

表 1 列出用本文并行计算程序获得的结果和文献[5]的计算结果.可以看出本文提供的程序不论在迭代次数上,还是在结果稳定性上均明显优于一般的模拟退火算法.从表 1 还可以看出,当程序使用者给出了错误的参数初始范围时(表中 b 栏),程序也能给出有效的修正,查找到真正的全局最小值点.

5 应用实例

实例 1 会聚束电子衍射图的优化与晶体 Debye-Waller 因子的测定^[6]

利用透射电子显微镜获得的会聚束电子衍射图(CBED pattern)包含了丰富的样品结构信息^[7],但其中大部分信息不是通过肉眼能够直观得到的.为了得到更多的样品信息,Spence,Zuo 等人发展了定量的会聚束电子衍射分析(QCBED)^[8].QCBED 的分析

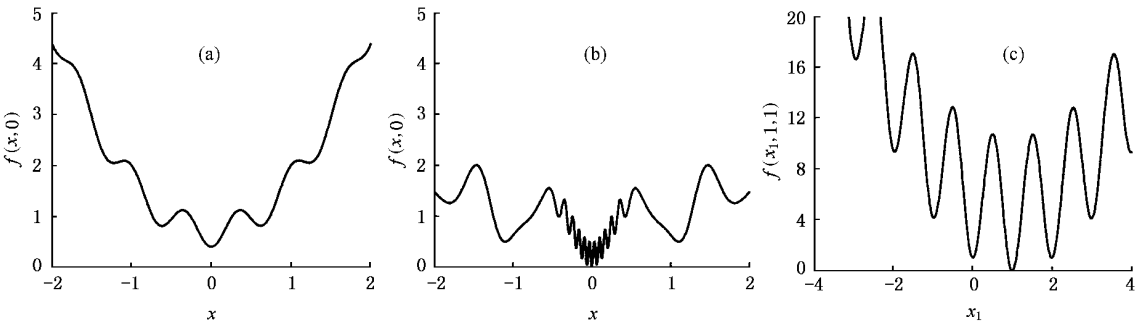


图 1 三种数学模型在 x 方向上的一维剖面图

表 1 三种数学测试函数的并行运算结果

	模型	理论最小值点 [*]	参数初始值 [*]	MPB [*]	运行次数	成功率/%	平均迭代次数 ^{**}
本文	$I(a)$	0.0	10.0	- 25.0— + 25.0	50	100	291
	$I(b)$	0.0	50.0	+ 25.0— + 75.0	50	100	295
	$\chi(a)$	0.0	0.5	- 1.0— + 1.0	50	96	6973
	$\chi(b)$	0.0	1.0	+ 0.5— + 1.5	50	98	23233
	$\mathfrak{X}(a)$	1.0	0.0	- 2.0— + 2.0	50	100	205
	$\mathfrak{X}(b)$	1.0	- 2.0	- 3.0— - 1.0	50	100	207
文献 5]	1	0.0	随机	—	50	100	18000
	2	0.0	随机	—	25	84	25000
	3	1.0	随机	—	25	92	38000

^{*} 对所有参数其数值一样。
^{**} 指每个处理器上的迭代次数,本文中处理器个数为 $N+1$ 个,即对模型 1 和 2 为 3 个,对模型 3 为 4 个,文献 5 中采用了 10 个处理器。

过程可以直观地用流程图表示出来,见图 2。通过计算 CBED 图与实验 CBED 图的反复拟合优化,获得实验条件和样品结构等各方面的信息。

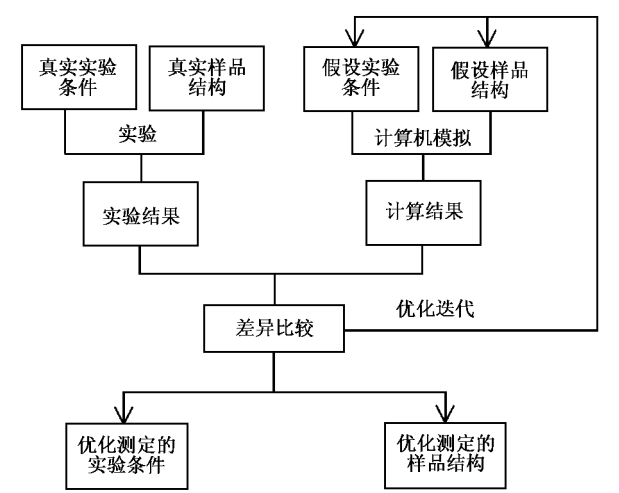


图 2 用于定量会聚束电子衍射分析的一般流程图

一幅会聚束电子衍射图的模拟需要输入很多参数,对于特定的物理问题,比如完整晶体 Debye-Waller 因子的优化,可以固定其中大部分参量,只包

含与 Debye-Waller 因子直接相关的量。即便如此,在本文的 Debye-Waller 因子优化中仍包含了 9 个参量。这些参量必须同时优化,因为这些参量之间有很强的相互作用。

在整个程序中, CBED 图的模拟计算、实验与计算的差异分析以及参量的优化迭代是相对独立的模块,因而有良好的可移植性。对于其他物理问题的优化计算,只要将其中的模拟计算部分替换即可。

图 3 给出实验与优化后的计算 CBED 图及它们之间的差异,可以看出两者差异很小,从而较精确地测定了 Co_3Ti 中各原子的 Debye-Waller 因子^[6]。

实例 2 俄歇电子能谱的实验数据分析^[4]

俄歇电子能谱是测定材料表面成分的一种常用工具。Li 等人 1990 年发展了一种不同能量峰组合的定量分析方法^[9]。用这一方法可以无损地检测材料近表面区几个原子层的成分-深度分布情况。但是由于俄歇电子来自于样品中一个很大的激发区域,所以这种方法得到的只是样品一定深度范围内的平均成分。这个平均成分与样品中各原子层的实际成分间有如下关系^[4,10]：

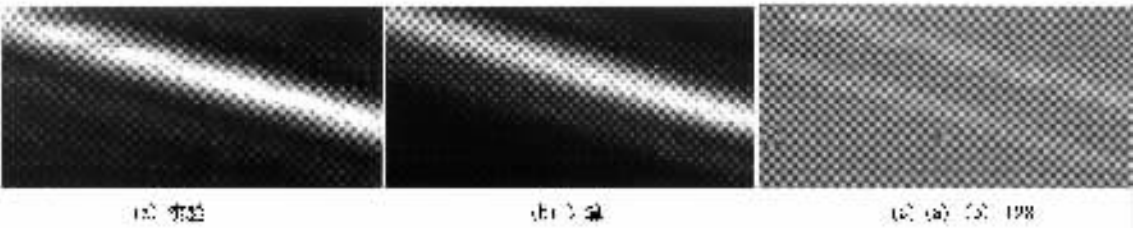


图 3 实验 CBED 图(a)、优化后的计算 CBED 图(b)及它们之间的差异(c)(为使差异明显,已将灰度级提高了 128 级)

$$\xi_E = \frac{\sum_{i=1}^{\infty} x_i \exp[-z_i(\text{合金})\lambda_E \cos 42.3^\circ]}{f \sum_{i=1}^{\infty} \exp[-z_i(\text{金})\lambda_E \cos 42.3^\circ]}, \quad (4)$$

其中 x_i 为第 i 个原子层的成分; λ_E 为俄歇电子的非弹性散射平均自由程(IMFP); z_i 为第 i 个原子层距样品表面的距离; f 为一个与材料中原子大小有关的常数.

利用(4)式可以反推出各原子层的实际成分. 这同样是一个多元函数求最值的问题: 先假定一系列各原子层“实际”成分, 计算出平均成分 ξ_E , 再与实

测成分比较, 根据比较结果修正假定, 重新计算成分……最后获得优化后的各原子层实际成分. 依据这样的思路对 Au-Cu 合金的由加热和离子轰击引起的表面成分变化进行了分析, 取得了一些新颖的结果. 详细的结果与分析参见文献[4].

6 总 结

本文改进了模拟退火算法, 并将其应用于两个不同的领域, 都取得了较好的结果. 相信这一算法与其他领域结合也能发挥其应有的作用.

[1] S. Kirkpatrick *et al.* , *Science* , **220**(1983) , 671 .

[2] S. Y. Li , M. Y. Wu , J. Zhu , *Ultramicroscopy* , **83**(2000) , 103 .

[3] S. Y. Li , Z. H. Du , M. Y. Wu *et al.* , *Intern. J. Modern Phys.* , **C10**(1999) , 1065 .

[4] S. Y. Li , R. S. Li , *Surf. Interf. Anal.* , **27**(1999) , 957 .

[5] X. L. Li , G. Y. Lei , *Computational Mathematics* , **4**(1996) , 435 (in Chinese) [李晓莉、雷功炎, 计算数学, **4**(1996) , 435].

[6] M. Y. Wu , S. Y. Li , J. Zhu *et al.* , *Acta Cryst.* , **A56**(2000) , 189 .

[7] J. Zhu , H. Q. Ye , R. H. Wang *et al.* , *High Spatial Resolution Analytical Electron Microscopy* (Science Press , Beijing , 1987) , p. 97 (in Chinese) [朱 静、叶恒强、王仁卉等, 高空间分辨分析电子显微学(科学出版社, 北京, 1987) , 第 97 页].

[8] J. M. Zuo , *Mater. Trans. JIM* , **39**(1998) , 938 .

[9] R. S. Li , C. F. Li , W. L. Zhang , *Appl. Phys.* , **A50**(1990) , 169 .

[10] J. M. McDavid , S. C. Fain , *Surf. Sci.* , **52**(1975) , 161 .

PARALLEL REALIZATION OF SIMULATED ANNEALING ALGORITHM : MODIFICATIONS AND APPLICATIONS *

LI SHU-YOU^{1,2)} DU ZHI-HUI³⁾ WU MENG-YUE^{1,4)} ZHU JING¹⁾ LI SAN-LI³⁾

¹⁾Electron Microscopy Laboratory , School of Materials Science and Engineering , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

²⁾Laboratory of Advanced Materials , Chinese Ministry of Education , Beijing 100084 , China)

³⁾Department of Computer Science and Technology , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

⁴⁾Central Iron and Steel Research Institute , Beijing 100081 , China)

(Received 12 February 2001 ; revised manuscript received 12 March 2001)

ABSTRACT

The simulated annealing algorithm was modified and realized on a home-made parallel super computer system THNPSC-1. The program was applied to the data analyses of two different physical domains : Convergent Beam Electron Diffraction and Auger Electron Spectroscopy. The good results obtained from these two domains indicated that the program is of high-performance and is applicable to various research regions. The source code is available free of charge from the authors.

Keywords : optimization , convergent beam electron diffraction , Auger electron spectroscopy

PACC : 0650 , 6114 , 6116D

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.59895154).