



**Fraunhofer** Institut  
Werkstoffmechanik

# Jahresbericht 2006

FIRE: Optimierung einfach gemacht

Leistungsbereich  
Physikalische Werkstoffmodellierung

Priv.-Doz. Dr. Michael Moseler  
Wöhlerstraße 11  
79108 Freiburg  
Telefon +49(0)761/5142-332  
[michael.moseler@iwf.fraunhofer.de](mailto:michael.moseler@iwf.fraunhofer.de)



# FIRE: Optimierung einfach gemacht

## Aufgabenstellung

Das Problem tritt häufig auf: z.B. beim Anpassen von Materialmodellen oder bei der Suche nach der energetisch günstigsten Struktur eines atomistischen Modells sucht man – ausgehend von einem Startpunkt  $x$  – das nächstgelegene Minimum einer vieldimensionalen Funktion  $E(x)$ . Am Beispiel des Schifahrers im Nebel lässt sich die Fragestellung am einfachsten erklären. Natürlich will er auf schnellstem Wege zur nächstgelegenen Talstation. Leider steht ihm nur lokale Information, d.h. nur die Richtung in der es im Augenblick am stärksten den Hang abwärts geht (der Mathematiker nennt das den Gradienten von  $E$ ), zur Verfügung, und man fragt sich nach einer guten Strategie für die ungemütliche Abfahrt. Es hat sich herausgestellt, dass man nicht dem Gradienten folgen sollte, da man dadurch zu häufig in kleine Gräben des Gebirges gelangt. Die Erfahrung zeigt, dass auch eine einfache Schussfahrt ziemlich übers Ziel hinauschießt.

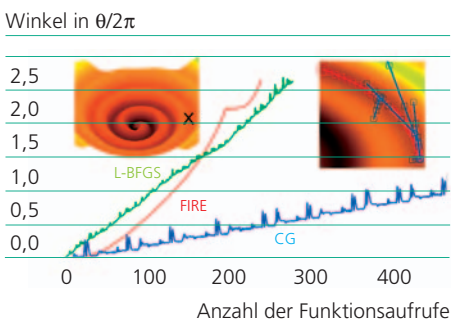


Abb. 1 Trajektorien verschiedener Optimierungs-Algorithmen in einem zweidimensionalen Spiralenpotenzial.

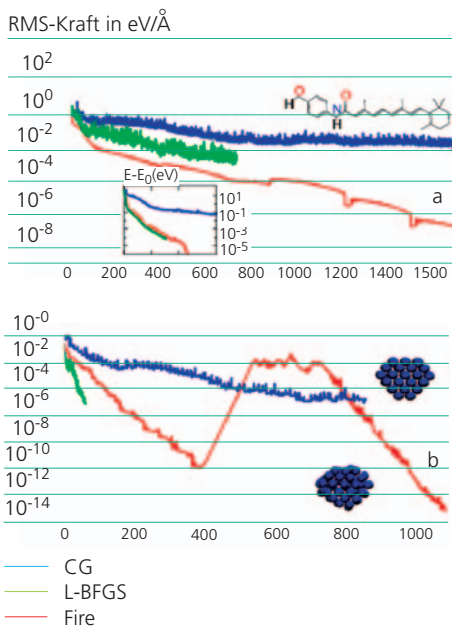


Abb. 2 Leistungsfähigkeit von FIRE bei der Optimierung des Moleküls Fenritinide (a) und eines Metallnanopartikels (b).

Was für den Schifahrer auf seiner zweidimensionalen Potenzialfläche  $E$  gilt, ist für die vieldimensionalen (bis zu einigen Millionen Freiheitsgrade) Funktionen der Materialforschung erst recht ein Problem. Numeriker haben deshalb recht komplexe Algorithmen wie z.B. konjugierte Gradienten oder Quasi-Newton-Methoden entwickelt, die aber oft keine allzu überzeugende Optimierungsgeschwindigkeit aufweisen.

## Vorgehensweise

Zusammen mit der Universität Karlsruhe wurde am Fraunhofer IWM ein Verfahren entwickelt, das den Schifahrer erstaunlich schnell an sein Ziel bringt. Wir würden ihm/ihr empfehlen, eine Schrägfahrt hangabwärts durchzuführen. Dabei ist aber darauf zu achten, dass sofort angehalten wird, wenn es bergauf geht. In diesem Fall dreht man sich in Richtung des Gradienten und beginnt die gesteuerte

Schussfahrt von vorne. Überraschenderweise funktioniert dieser Algorithmus auch in beliebig hohen Dimensionen und ist selbst dort noch extrem leistungsfähig. Es konnte gezeigt werden, dass dieses einfache Verfahren den herkömmlichen Algorithmen meist ebenbürtig und in vielen Fällen überlegen ist. Da der neue Optimierer auf einer modifizierten Newtonschen Dynamik basiert (d.h. Inertialeffekte nutzt), wurde er Fast Inertial Relaxation Engine (kurz FIRE) getauft. Er wurde auch im renommierten Fachblatt The Physical Review Letters publiziert und als US-Patent angemeldet.

## Ergebnisse

Abb. 1 zeigt, dass sich FIRE (rote Kurve) dem Minimum einer Spirale schneller nähert als die Konjugierte-Gradienten-Methode (blau Linie) oder ein Quasi-Newton-Verfahren (grün). Hierbei ist der aktuelle Azimutalwinkel (gemessen vom Minimum aus) gegen die Anzahl der benötigten Funktionsaufrufe dargestellt. In Abb. 2 wird die Optimierung von Fenritinide (ein Molekül zur Krebsbekämpfung) und eines Natrium Nanopartikels gezeigt. Die Ordinate ist die Größe der aktuellen Kraft, also ein Maßstab für Abweichung vom gesuchten Gleichgewicht. Auch in diesen Fällen demonstrierte FIRE seine Überlegenheit.

## Leistungsbereich Physikalische Werkstoffmodellierung

Durch eine Modellierung des Werkstoffes über alle Skalen (d.h. vom Atom zum Kontinuum) können Designregeln zur Werkstoff- und Prozessverbesserung entwickelt werden. Dabei muss häufig die Energie des Modells minimiert werden.

## Ansprechpartner

Priv.-Doz. Dr. Michael Moseler  
[michael.moseler@iwm.fraunhofer.de](mailto:michael.moseler@iwm.fraunhofer.de)