

30. Kofferpacken (20 Punkte)

Suchen Sie eine Aufteilung Ihrer Gepäckstücke (Quadratzahlen von $\{1^2, 2^2, \dots, 42^2\}$) auf sieben Koffer, so dass jeder Koffer möglichst gleich gepackt ist, sprich eine möglichst gleiche Summe von Quadratzahlen enthält. Die zu verwendende Methode läuft unter dem Stichwort "Simulated Annealing".

Dazu: offensichtlich ist die ideale Füllung pro Koffer $c = \frac{1}{7} \sum_{n=1}^{42} n^2 = 3655$. Die Füllung Σ_{K_i} eines der sieben Koffer K_i ist gegeben als $\Sigma_{K_i} = \sum_{q \in K_i} q$, also einfach als Summe seiner enthaltenen Gepäckstücke (Quadratzahlen). Wir führen eine Energie-Funktion

$$H(K_1, K_2, \dots, K_7) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^7 (\Sigma_{K_i} - c)^2$$

ein. Betrachten Sie nun eine Irrfahrt, bei der ein einzelner Schritt die Verlegung eines einzigen Gepäckstückes q_{K_i} von einem Koffer K_i in einen anderen Koffer K_j ist. Die Übergangswahrscheinlichkeiten $P(\mathbf{K}_i \rightarrow \mathbf{K}_j)$ einer Kofferkonfiguration $\mathbf{K}_i$ sollen die Bedingungen des detaillierten Gleichgewichtes bezüglich der Gewichte $W(\mathbf{K}_i) = e^{-\beta H_i}$ erfüllen, d.h. im thermodynamischen Gleichgewicht soll

$$P(\mathbf{K}_i \rightarrow \mathbf{K}_j)W(\mathbf{K}_i) = P(\mathbf{K}_j \rightarrow \mathbf{K}_i)W(\mathbf{K}_j)$$

gelten. Diese Bedingung wird von Metropolis-Übergangswahrscheinlichkeiten erfüllt:

$$P(\mathbf{K}_i \rightarrow \mathbf{K}_j) = \min\left(1, \frac{W(\mathbf{K}_j)}{W(\mathbf{K}_i)}\right).$$

Lässt man diese Irrfahrt eine Weile laufen (ca. 100-1000 Koffer-Updates pro Temperatur), werden die Zerlegungen nach der kanonischen Gesamtheit zur Energie H verteilt sein.

- Tragen Sie bei mehreren, verschiedenen Temperaturen die Verteilung der Energie auf, z.B. als Histogramm in geeigneter Skalierung.
- Zeigen Sie experimentell, dass der Prozess für niedrige Temperaturen (große β) einer direkten Minimalisierung von H durch Verlegung einzelner Gepäckstücke entspricht und meist zügig in uninteressante Nebenminima läuft.
- Beginnen Sie nun den Prozess bei hoher Temperatur ($\beta < 10^{-5}$), so dass auch für große Gepäckstücke die Sprungwahrscheinlichkeit in einen anderen Koffer noch merklich von Null verschieden ist. Verkleinern Sie dann sukzessiv die Temperatur und heizen Sie das System nach Bedarf kurz auf, um aus Nebenminima herauszukommen. Eine Automatisierung der Temperaturabsenkung ist an dieser Stelle natürlich praktisch aber nicht unbedingt erforderlich. Sie sollten auf diese Weise schnell Energien ≤ 200 erreichen. Finden Sie auch eine exakte Zerlegung?

Hinweise: die Programme können mit Java, C, C++, Mathematica oder Matlab abgegeben werden, und zwar als Ausdruck und zusätzlich in elektronischer Form¹. In die Bewertung dieser Aufgabe gehen neben dem erreichten Energiewert und den Histogrammen auch die Umsetzung/Lauffähigkeit des Programmes sowie dessen Dokumentation ein. Zu jeder angegebenen Energie gehören selbstverständlich auch die Gepäckstücke in jedem der sieben Koffer, um den Energiewert verifizieren zu können. Bei Fragen während der Feiertage bitte E-Mail an: s-n.grossjohann@tu-bs.de. p.s.: Die beste Lösung bekommt einen Schoko-Weihnachtsmann! :)

Schöne Feiertage!!

¹Code per E-mail an s-n.grossjohann@tu-bs.de