

Packen wie die Weltmeister

Von Johannes Josef Schneider und Elmar Schömer

Jeder kennt das Problem: Die Einkäufe vom Wochenende sind auf dem Parkplatz des Supermarktes im Kofferraum eines Autos zu verstauen. Aber wie packt man nun die verschiedenen Sachen, die man gekauft hat, so hinein, dass alles reinpasst und dass auch nichts beschädigt wird? Genauso ergeht es einem, wenn ein Koffer vor einer Flugreise zu packen ist oder wenn man mit dem Auto in Urlaub fährt und möglichst viel in den Kofferraum packen will.

Ähnliche Packprobleme treten auch in der Wirtschaft auf, zum Beispiel bei Transportunternehmen, wie etwa Paketdiensten, die möglichst viele Pakete in einem kleinen Lastwagen unterzubringen haben und dabei auch die Auslieferungsreihenfolge beachten müssen. Schließlich soll ja der Lieferant nicht den halben Lastwagen ausräumen müssen, um an das gewünschte Paket zu gelangen. Weitere Packprobleme ergeben sich in der Textilindustrie: Aus Stoffbahnen müssen nach vorgegebenen Schnittmustern Teile ausgeschnitten werden, die dann später zu Kleidung vernäht werden. Dabei soll die Menge des Verschnitts minimiert werden. Analoge Probleme gibt es in der Holz und in der Metall verarbeitenden Industrie.

Wie bei vielen anderen Problemstellungen auch lohnt es sich im industriellen Bereich fast immer, derartige Optimierungsprobleme nicht selbst von Hand anzugehen, sondern sie vom Computer bestmöglich lösen zu lassen; so kann möglichst billig produziert oder ausgeliefert werden. Dazu benötigt man natürlich einen ausgefeilten Optimierungsalgorithmus, der eine möglichst gute Lösung für das vorgegebene Optimierungsproblem liefert. Aber leider sind Packprobleme zumeist sehr komplex, so dass die Entwicklung eines derartigen Algorithmus eine große Herausforderung darstellt.

In der Physik und Mathematik beschäftigt man sich ebenfalls mit verschiedensten Packproblemen, die wissenschaftlich relevant sind. Derzeit untersucht beispielsweise Diplomandin Sebiha Sahin, wie man gleich große Kugeln möglichst dicht packen kann oder wie viele Kugeln maximal um eine Kugel platziert werden können, so dass sie diese berühren; Letzteres ist als Kissing Number Problem bekannt. Derartige Probleme betrachtet man nicht nur in zwei bzw. in drei Dimensionen, man geht auch zu höheren Dimensionen über, da diese Packprobleme Anwendungen zum Beispiel im Bereich der Digitalkommunikation haben.

Dabei geht man zumeist so vor, dass man zunächst vereinfachte Probleme studiert, für diese Probleme dann einen möglichst guten Algorithmus entwickelt und diesen dann schließlich für komplexere Problemstellungen aus der Realität anpasst. Um die Güte verschiedener Algorithmen besser vergleichen zu können, werden von verschiedenen Forschergruppen einfache Beispielpakete publiziert, die dann andere Gruppen zum Vergleich heranziehen können. Manchmal werden sogar regelrechte Wettbewerbe ausgeschrieben, bei denen neben dem Ruhm hin und wieder sogar kleine Geldpreise oder Trophäen für die besten Teilnehmer winken.

Ein derartiger Programmierwettbewerb wurde kürzlich von Al Zimmermann veranstaltet. Dabei sollten Kreisscheiben mit unterschiedlich großen ganzzahligen Radien (die kleinste Kreisscheibe sollte den Radius 1 haben, die zweitkleinste den Radius 2 usw.) so in einen umschließenden Kreis gepackt werden, dass der Radius dieses Umkreises minimal wird. Insgesamt wurden 46 Problemstellungen mit 5 bis 50 Kreisscheiben betrachtet, wobei eben bei dem Problem mit nur 5 Kreisscheiben diese die Radien 1, 2, 3, 4 und 5 hatten und bei dem Problem mit 50 Kreisscheiben alle ganzen Zahlen zwischen 1 und 50 als Werte für die Radien dienten. Die Grafiken in Abbildung 1 zeigen die von uns gefundenen neuen Weltrekordlösungen für die Probleme mit 30, 40 und 50 Kreisscheiben. Die Zahlen in den größeren Kreisscheiben geben ihre Radien an.

Ähnliche Problemstellungen, beispielsweise mit gleich großen Kreisscheiben, werden schon seit Jahrzehnten studiert. Bei der Aufgabenstellung dieses Wettbewerbs bestand die Neuerung somit hauptsächlich darin, dass die Größe der verschiedenen Kreisscheiben stark variiert. Aufgrund dieser Neuerung auf der einen Seite und der Verwandtschaft mit bereits bekannten Problemen auf der anderen Seite war das Interesse von zahlreichen Wissenschaftlern an dieser Aufgabenstellung geweckt worden. Insgesamt nahmen 155 Gruppen aus 32 Ländern an diesem Wettbewerb teil und reichten ihre Ergebnisse ein. Schließlich wurde die von Addis, Locatelli und Schön gebildete Teilnehmergruppe, die die meisten Weltrekorde aufgestellt hatte, zum Sieger erklärt und die von den verschiedenen Gruppen erreichten Ergebnisse veröffentlicht. Wie bei sportlichen Wettkämpfen auch, zeigte sich, dass die besten Gruppen zumeist gar nicht so weit auseinander lagen.

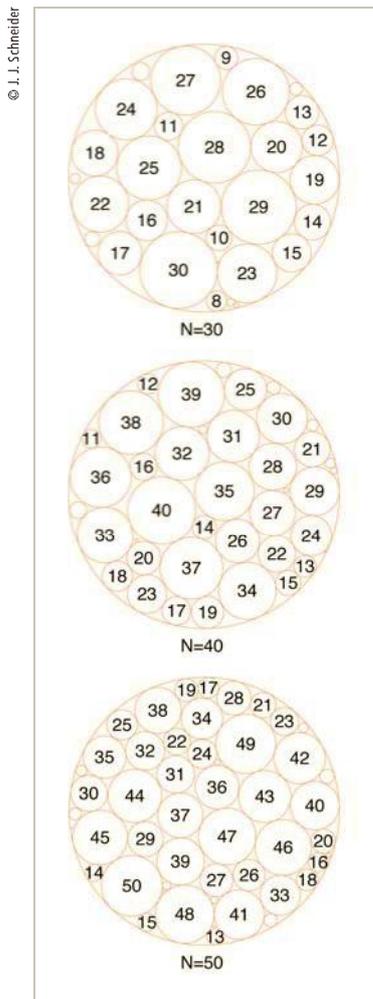


Abb. 1: Weltrekordlösungen für Kreispackungsprobleme mit 30, 40 und 50 Kreisscheiben.

Seit Kurzem arbeiten wir innerhalb des Schwerpunkts „Rechnergestützte Forschungsmethoden in den Naturwissenschaften“ in einem interdisziplinären Projekt der Institute für Physik und für Informatik an der Entwicklung eines Computer-Algorithmus zur Lösung von allgemeinen Packproblemen. Dabei sollen Methoden und Erkenntnisse aus diesen beiden Fachrichtungen einfließen, um einen möglichst guten Algorithmus zu entwickeln. Dieser baut zum einen auf einem in der Physik entwickelten stochastischen Optimierungsalgorithmus auf, der das Problem ganzheitlich betrachtet, die Kreisscheiben kräftig durchrüttelt und somit global nach der besten Lösung sucht. Zum anderen basiert er auf einer numerischen Methode aus der Informatik, die lokal nach Verbesserungen sucht und somit das Gesamtsystem noch ein wenig zusammenpresst.

Der globale Algorithmus baut auf der inzwischen schon klassischen physikalischen Optimierungsmethode Simulated Annealing auf. Dabei setzt man anfangs die Kreisscheiben rein zufällig in die Landschaft. Danach wird die Anordnung der Kreisscheiben Schritt für Schritt verändert, indem man beispielsweise eine Kreisscheibe leicht verschiebt oder ihr einen ganz neuen Ort in der Packung zuweist. Eine weitere Möglichkeit der Änderung einer Anordnung besteht darin, zwei unterschiedlich große Kreisscheiben schlicht auszutauschen. Eine derartige Veränderung kann nun dazu führen, dass sich der Radius des Umkreises verändert, wenn man zum Beispiel die äußerste Kreisscheibe etwas nach innen schiebt. Auf der anderen Seite kann es auch passieren, dass zwei Kreisscheiben plötzlich teilweise übereinander liegen. Ein derartiger Überlapp ist eigentlich verboten. Aber ähnlich wie im realen Leben, wo man manchmal zu schnell fährt und somit ein Bußgeld riskiert, geht man hier so vor, dass ein derartiger Überlapp nicht generell verboten sein soll, sondern man darauf stets ein virtuelles Bußgeld zu entrichten hat. Die Strafe fällt umso höher aus, je größer der Überlapp ist. Die einzelnen Bußgelder für die verschiedenen Überlapps werden dann zum Radius des Umkreises hinzugezählt, wodurch sich eine Gesamtsumme bildet, die man wirtschaftlich als Kosten oder physikalisch als Energie interpretieren kann. Ist nun die zum Vorschlag stehende Konfiguration besser als die vorhergehende, so geht man zur neuen Anordnung über. Jedoch erlaubt man mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit auch den Übergang zu einer schlechteren Anordnung. In diese Wahrscheinlichkeit geht das Ausmaß der Verschlechterung ein, so dass die Wahrscheinlichkeit, geringe Verschlechterungen anzunehmen, größer ist als die Wahrscheinlichkeit von großen Verschlechterungen. Aber generell wird die Wahrscheinlichkeit, eine Verschlechterung anzunehmen, während des Optimierungslaufs schrittweise verringert, bis zum Schluss nur noch Verbesserungen akzeptiert werden. Auf diese Art und Weise wird die Packung schrittweise immer besser, bis die Kreisscheiben schließlich ziemlich nahe aneinander liegen.

Um noch verbleibende kleine Lücken zu entfernen, wird dann noch ein lokales Optimierungsverfahren zum Einsatz gebracht. Dabei schiebt man die äußerste Kreisscheibe zunächst etwas nach innen, wodurch sich einerseits, wie gewünscht, der Radius des zu minimierenden Umkreises verringert; andererseits ergeben sich bedauerlicherweise aber oft auch Überschneidungen, die man dann wieder auflösen muss, indem man sich überschneidende Kreisscheiben so weit auseinander schiebt, bis sie sich nur noch berühren. Dieses Reinklopfen der äußersten Kreisscheibe mit anschließendem Auflösen der Überschneidungen wiederholt man solange, bis sich keine Verbesserung mehr erzielen lässt.

Die in dem Wettbewerb gestellte Aufgabe erwies sich nun als ideale Möglichkeit, die Güte unseres Algorithmus zu testen und diesen immer weiter zu verbessern. Dabei entsprang sogar zwischen Elmar Schömer von der Informatik, Johannes J. Schneider von der Physik und dem gemeinsamen Diplomanden André Müller ein freundschaftlicher interner Wettbewerb um die besten Lösungen. Während es André Müller als Erstem gelang, einige der Weltrekorde aus dem Wettbewerb zu brechen, und Elmar Schömer zwischendurch einen neuen Weltrekord für das Problem mit 49 Kreisscheiben aufstellte, ist nun Johannes J. Schneider alleiniger Weltrekordhalter: Bei den kleineren Problemstellungen mit bis zu 23 Kreisscheiben sowie beim Problem mit 25 Kreisscheiben hat er alle Weltrekorde eingestellt. Bei den größeren Problemstellungen mit 24 Kreisscheiben bzw. mit 26 bis 50 Kreisscheiben hat er sämtliche neuen Weltrekorde aufgestellt, die die vorherigen zum Teil sogar deutlich unterbieten.

Diese Ergebnisse riefen ein großes Medienecho hervor. So berichteten unter anderem das ZDF am 9. April 2009 in den Sendungen *Drehscheibe Deutschland* und *heute Nacht*, die ARD am 2. Juli 2009 in der Sendung *Nachtmagazin*, New Scientist Online am 6. März 2009, Spiegel Online am 23. März 2009, die Frankfurter Rundschau am 24. März 2009 und die Frankfurter Allgemeine Zeitung am 31. März 2009. Außerdem erschienen Artikel in zahlreichen Lokalzeitungen.

Jedoch interessieren wir uns nicht nur für die Weltrekordwerte und für die Art und Weise, wie unsere Algorithmen auf einer derartigen Problemstellung arbeiten und wie wir sie tun müssen. Es geht uns auch um ganz konkrete Fragestellungen aus der Praxis: Ist es zum Beispiel sinnvoll, die größeren Teile nebeneinander zu packen, oder sollten größere Teile generell von mittelgroßen Teilen

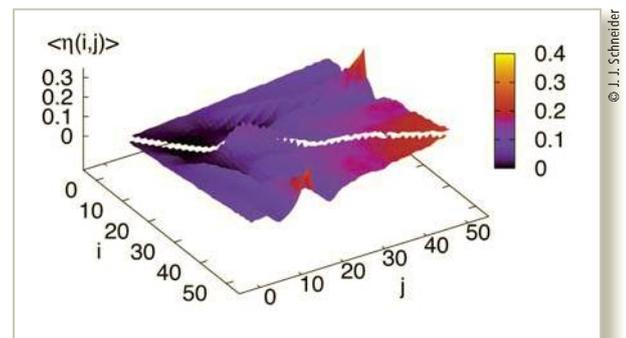


Abb. 2: Hier wird angezeigt, wie groß die relative Wahrscheinlichkeit dafür ist, dass zwei unterschiedlich große Kreisscheiben mit den Radien i und j direkt nebeneinander liegen.

umgeben sein? Dazu vergleichen wir beispielsweise für das Problem mit 50 Kreisscheiben die besten Lösungen miteinander, die wir dafür erhielten. Für die in Abbildung 2 gezeigte Grafik haben wir etwa 10.000 Lösungen miteinander verglichen, die wir bei unseren Versuchen erhielten und die fast so gut wie die Weltrekordlösung sind. Die Zahlen auf der x- und der y-Achse geben die Radien „i“ und „j“ zweier Kreisscheiben an, nach oben ist aufgetragen, wie häufig die beiden jeweiligen Kreisscheiben nebeneinander liegen. Ein Wert von 1 für ein Paar von Kreisscheiben würde bedeuten, dass diese in allen Lösungen zueinander benachbart sind. Dabei ergibt sich kein eindeutiges Bild. Es ist also beispielsweise nicht so, dass die Kreisscheibe mit Radius 37 stets neben der Kreisscheibe mit Radius 49 liegen muss, um eine möglichst gute Lösung zu erhalten. Dennoch erkennt man gewisse Tendenzen: So ist es offensichtlich vorteilhaft, die großen Kreisscheiben nebeneinander zu platzieren. Zudem zeigt sich, dass Kreisscheiben mit den Radien 14-16 sehr gerne direkt neben den größten Kreisscheiben liegen. Hier stellt sich nun die Frage, warum dem so ist. Wenn man sich nochmals die obigen Weltrekordlösungen ansieht und diese genauer analysiert, so beantwortet sich diese Frage von selbst: Liegen zwei der größten Kreisscheiben beim Problem mit 50 Kreisscheiben direkt nebeneinander am Rand, so ist in dem Loch zwischen ihnen und dem Umkreis gerade so viel Platz, dass noch eine Kreisscheibe mit einem Radius von etwa 15 hineinpasst. Es ist somit optimal, eine derartige Kreisscheibe in dieses Loch zu stecken, da sie zum einen dieses sowieso dort vorhandene Loch gut ausfüllt und zum anderen woanders keinen Platz wegnimmt.

Für diese 10.000 Lösungen, die in unserer statistischen Auswertung miteinander verglichen wurden, benötigten wir natürlich auch eine große Menge an Rechenzeit. Insofern wurden diese Rechnungen zum Teil auf einem großen Parallelrechner mit Hunderten von Prozessoren im Forschungszentrum Jülich sowie im Rechenzentrum der Johannes Gutenberg-Universität Mainz durchgeführt, wo ein großer Rechencluster zur Verfügung steht. Zudem haben wir vor Kurzem damit begonnen, auch moderne Grafikkarten für unsere Optimierungsläufe heranzuziehen. Dank der Computerspiele-Industrie ist die Entwicklung von immer leistungsfähigeren Grafikkarten rasant fortgeschritten: Während es zum Beispiel bei einem Adventure-Game vor zehn Jahren noch genügte, einen Magier statisch zu zeigen, will man heute sehen, wie sein Bart im Wind flattert, wobei jedes einzelne Barthaar zu erkennen sein soll. Die dafür zur Verfügung stehende Rechenpower kann auch in sinnvoller Bahnen gelenkt werden, um wissenschaftliche Berechnungen direkt auf Grafikkarten durchzuführen. Erste Erfahrungen wurden dabei von Tobias Preis, Doktorand von Johannes Josef Schneider und Juniormitglied der Gutenberg-Akademie, gesammelt. Er implementierte das Standardmodell der statistischen

Physik, das Ising-Modell, und erzielte im Vergleich zu einer modernen CPU, der herkömmlichen zentralen Recheneinheit eines Computers, auf einer Geforce GTX280-Grafikkarte von Nvidia einen Beschleunigungsfaktor von 60. Ebenso untersuchte er auf dieser Architektur Finanzmarktdaten und implementierte komplexere numerische Methoden aus dem Bereich der Zeitreihenanalyse. Aufbauend auf den dabei gewonnenen Erkenntnissen gelang es André Müller, den Optimierungsalgorithmus ebenfalls auf eine Grafikkarte zu übertragen und ähnliche Beschleunigungsfaktoren zu erreichen.

Summary

Packing like a champion. We work in an interdisciplinary research project spanning physics and computer science on the development of a high performance optimization algorithm for packing problems. We were able to prove the superiority of our algorithm for a problem in which disks of various sizes have to be packed in a circumcircle with minimum radius. All world records, which were established in competition between 155 groups from 32 countries in an international contest, were either matched or beaten by our algorithm.



Foto: studio Stern, Straubing

PD Dr. Johannes Josef Schneider

Johannes Josef Schneider, geb. 1971, studierte Physik in Regensburg (1990-1995), wo er 1999 auch promovierte; von 1995-1997 mehrmonatige Aufenthalte am

Wissenschaftlichen Zentrum von IBM in Heidelberg; von 2000-2001 Assistent an der Universität Zürich; 2001-2002 Postdoktorand an The Hebrew University of Jerusalem; seit Oktober 2002 an der Johannes Gutenberg-Universität Mainz; im Mai 2009 Habilitation (Buch: J. J. Schneider und S. Kirkpatrick, Stochastic Optimization, Springer, 2006, ISBN 3540345590); seit 2008 stellvertretender Leiter des Fachverbandes Physik sozio-ökonomischer Systeme der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. Forschungsschwerpunkte: Entwicklung und Anwendung von Optimierungsalgorithmen; paralleles Höchstleistungsrechnen; Verkehrs-, Sozio- und Ökonophysik.



E. Schömer

Univ.-Prof. Dr. Elmar Schömer

Das Curriculum Vitae von Elmar Schömer finden Sie auf Seite 25.

Kontakt

PD Dr. Johannes Josef Schneider
 Johannes Gutenberg-Universität Mainz
 Staudinger Weg 7
 D-55099 Mainz
 Tel. +49 (0) 6131-3923 646
 Fax +49 (0) 6131-3925441
 Email: schneidj@uni-mainz.de
 www.staff.uni-mainz.de/schneidj