Thema für eine Programmierpraktikum:

Lineare Optimierung mit vielen rechten Seiten

Problembeschreibung:

Die plastische Verformung eines kristallinen Materials erfolgt durch das Gleiten von Atomebenen. Das Gleiten ist durch den Normalenvektor $\boldsymbol{n} \in \mathbb{R}^3$ der Gleitebene und die Gleitrichtung $\boldsymbol{d} \in \mathbb{R}^3$, $\boldsymbol{d} \perp \boldsymbol{n}$ beschrieben. Ein solches Paar $(\boldsymbol{n}, \boldsymbol{d})$ von Gleitebene und Gleitrichung heißt *Gleitsystem*. Für jedes kristallines Material sind Gleitsysteme $(\boldsymbol{n}_k, \boldsymbol{d}_k)$, $k = 1, \dots, K$ bekannt entlang welcher sich das Material besonders leicht verformt.

Eine beliebige Verformung eines Volumenelements kann durch einen symmetrischen Tensor zweiter Ordnung bzw. durch eine symmetrische Matrix $\boldsymbol{\mathcal{E}} \in \mathbb{R}^{3\times3}$ dargestellt werden. Die Verformung welche durch Atomgleiten in einem Gleitsystem $(\boldsymbol{n}_k, \boldsymbol{d}_k)$ generiert wird ist der symmetrischen Anteil

$$\boldsymbol{\varepsilon}_k = \frac{1}{2}(\boldsymbol{n}_k \cdot \boldsymbol{d}_k^T + \boldsymbol{d}_k \cdot \boldsymbol{n}_k^T) \in \mathbb{R}^{3\times3}$$

der Rank 1 Matrix $\boldsymbol{n}_k \cdot \boldsymbol{d}_k^T$.

Ist ein Material durch äußeren Zwang einer gegebenen Verformung $\boldsymbol{\mathcal{E}}$ unterworfen. So wird diese auf atomarer Ebene durch eine Überlagerung der bekannten Gleitverformungen $\boldsymbol{\varepsilon}_k$, $k = 1, \dots, K$ realisiert, d.h. es gibt Koeffizienten $b_k \geq 0$, $k = 1, \dots, K$ so, dass

$$\sum_{k=1}^{K} b_k \boldsymbol{\varepsilon}_k = \boldsymbol{\mathcal{E}}. \tag{1}$$

Da die Anzahl der Gleitsysteme $K \approx 10$ in einem Kristall größer ist als die Dimension 6 der rechten Seite, ist das Gleichungssystem (1) unterbestimmt. Aus physikalischer Sicht sind die Lösungen interessant für welche die Taylorenergie $\sum_{k=1}^{K} b_k$ minimal wird. Das führt zu dem linearen Minimierungsproblem

$$\boldsymbol{b} = \operatorname*{argmin}_{\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}_+^K} \sum_{k=1}^{K} b_k \text{ unter der Nebenbedingung } \sum_{k=1}^{K} b_k \boldsymbol{\varepsilon}_k = \boldsymbol{\mathcal{E}}. \tag{2}$$

Für die Simulation von Materialverformungen ist es wichtig das Minimierungsproblem (2) für eine große Anzahl von rechten Seiten $\boldsymbol{\mathcal{E}} = \boldsymbol{\mathcal{E}}_m$, $m = 1, \dots, M$, $M \approx 10^7$ numerisch zu lösen.

Aufgabenstellung:

Aufgabe des Programmierpraktikums ist es verschiedene Methoden zur Lösung linearer Optimierungsprobleme hinsichtlich ihrer Effizients für viele rechte Seiten zu untersuchen. Der entwickelte Algorithmus zur Bestimmung der Koeffizienten b_k soll Teil der Matlab Toolbox MTEX werden.

Prorammiersprache: Matlab

Betreuer:

Dr. Ralf Hielscher
email: Ralf.Hielscher@mathematik.tu-chemnitz.de
Adresse: Reichenhainer Str. 39, Zimmer 727