Thema für ein 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 $(\boldsymbol{n}_k, \boldsymbol{d}_k)$, $k = 1, \ldots, K$ 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 $\boldsymbol{\mathcal{E}} \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ dargestellt werden. Die Verformung welche durch Atomgleiten in einem Gleitsystem $(\boldsymbol{n}_k, \boldsymbol{d}_k)$ generiert wird ist der symmetrischen Anteil

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

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 $\boldsymbol{\varepsilon}_k$, $k = 1, \ldots, K$ realisiert, d.h. es gibt Koeffizienten $b_k \geq 0$, $k = 1, \ldots, K$ 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

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

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

Aufgabenstellung:

Aufgabe des Computerpraktikum ist es verschiedene Methoden zur Lösung linearer Optimierungsprobleme in Matlab zu implementieren und zu erweitern, dass Sie für das obige Problem möglichst effizient sind. Außgangspunkt für eine solche Erweiterung könnte die Beobachtung sein, dass für ähnliche rechte Seiten $\boldsymbol{\mathcal{E}}_m$ die zugehörigen Lösungen $\boldsymbol{b}^m$ ebenfalls ähnlich sind.

Der entwickelte Algorithmus zur Bestimmung der Koeffizienten b_k soll Teil der Matlab Toolbox MTEX werden.

Betreuer:

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