

Studienarbeit

Modellierung räumlicher Objektverteilungen mittels stochastischer Optimierung

Das ständig zunehmende Leistungsvermögen computergestützter numerischer Simulationstechniken eröffnet auch im Bereich der Materialwissenschaften neue Möglichkeiten für effektive Modellrechnungen. Als wesentlich für erfolgreiche Vorhersagen erweist sich dabei die meist erforderliche Reduktion des betrachteten Gesamtsystems auf eine beschreibbare, repräsentative Einheit. Der Bereitstellung realistischer Modelle kommt somit besondere Bedeutung zu. Auf dem wichtigen Anwendungsgebiet der Prozesssimulation stellt sich dabei häufig das Problem der Ermittlung von zwei- und dreidimensionalen Modellverteilungen für räumliche Objekte in einer Matrix. Die Materialcharakterisierung erfolgt mittels mikroskopischer Methoden (Licht-, Rasterelektronen- oder Durchstrahlungselektronenmikroskopie) durch die für eine repräsentative Gefügeübersicht notwendige Anzahl entsprechender Aufnahmen. Mit den vielseitigen Möglichkeiten der modernen digitalen Bildanalyse lassen sich daraus bei verhältnismäßig geringem Aufwand alle zur Erstellung des gewünschten Modells erforderlichen Informationen über Lage, Form und Größe der zu beschreibenden Objekte entnehmen. Die Aufgabe der Modellerstellung ist es, eine räumliche Ersatzverteilung vorgegebener Größe (Partikelzahl) entsprechend den aus der Bildanalyse gewonnenen Daten zu erstellen. Eine wichtige Anwendung liegt z. B. bei der Verteilung von Carbiden in Stählen.

Ein einfaches Modell besteht darin, die Abstände der Partikel zum jeweils nächsten Nachbarn als den die Lage charakterisierenden Parameter heranzuziehen. Die Teilchengröße lässt sich wiederum in Abhängigkeit vom Nachbarabstand erfassen. Für ein solch einfaches Modell wurde bereits ein Lösungsverfahren entwickelt, welches die Ersatzverteilung mittels einer einfachen Konstruktionsheuristik erstellt.

Die Güte des Modells lässt sich dadurch erhöhen, indem auch die Abstände zu den weiter entfernten (übernächsten, etc.) Nachbarpartikeln in der Modellbildung berücksichtigt werden. Hierzu kann für jede Nachbarschaftsordnung die Abstandsverteilung separat erfasst werden (sog. ungekoppelte Abstandsverteilung), oder aber die Verteilung der Abstände höherer Ordnung in Abhängigkeit der jeweils niedrigeren Ordnung (sog. gekoppelte Abstandsverteilung).

Das bisherige Verfahren hat sich als nicht geeignet erwiesen, Modelle mit höheren Nachbarschaftsordnungen zu bewältigen. Im Rahmen dieser Arbeit soll daher das Problem der Erstellung von Ersatzverteilungen mittels stochastischer Optimierung gelöst und geprüft werden, ob und ggf. wie damit die Einbeziehung höherer Nachbarschaftsordnungen in das Modell möglich ist.

In der Arbeit sind folgende Punkte zu bearbeiten:

1. Beschreibung der Modellbildung.
2. Darstellung des bisherigen Verfahrens.
3. Entwicklung eines Verfahrens zur Modellerstellung beruhend auf einer stochastischen Verbesserungsheuristik.
4. Demonstration des Verfahrens an einem Beispiel.