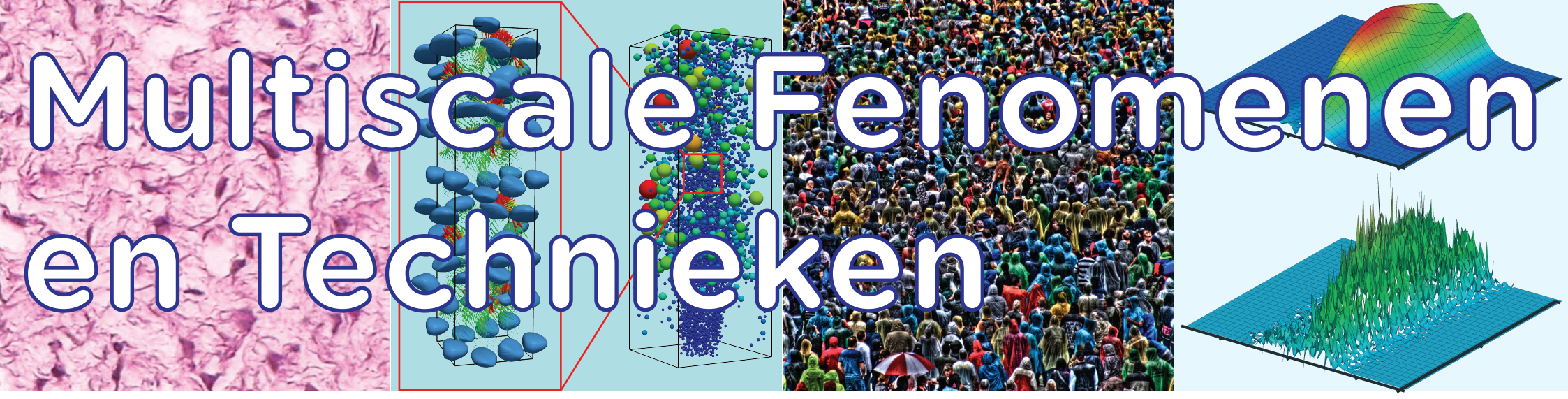
Multiscale Fenomenen en Technieken



Inleiding Asymptotische Technieken

Het vak Inleiding Asymptotische Technieken behandelt de wiskundige basis van multiscale modellen. Om problemen met meerdere schalen te kunnen beschrijven, is het belangrijk om precies onderscheid te maken tussen wat "groot" en "klein" is. Noodzakelijk hiervoor is dimensieloos maken door grootheden te normaliseren op relevante lengte- en tijdsschalen. De dimensieloze parameters geven dan aan wat belangrijke en onbelangrijke effecten zijn. Soms heeft een probleem meerdere, ver uit elkaar liggende schalen die toch beide belangrijk zijn, bijvoorbeeld, de micro schaal waarop moleculen botsen en energie uitwisselen en de macro schaal waarop deze uitwisseling zich aan ons toont als diffusie, of de dunne grenslaag van een stroming waar de viskeuze effecten zich concentreren en de hoofdstroming. In een multiscale aanpak kijken we naar beide schalen en hun koppeling. Essentieel is het begrip van schalen en het effect van grote en kleine parameters.

"More is Different"
— P.W. Anderson

Het reduceren van een macroscopisch systeem tot microscopische bouwstenen leidt niet automatisch tot begrip van het systeem. Multiscale Science richt zich op het verklaren van de relatie tussen verschijnselen op verschillende lengte- en tijdsschalen.

Multiscale Fenomenen en Technieken is een interfacultair pakket voor Wtb/TN/ST/Wisk (primair) en BMT/Bk/EE (secundair). Dit pakket maakt studenten bekend met het begrip multiscale, met bijbehorende fenomenen in verschillende toepassingen en met speciale modellerings- en rekentechnieken voor problemen met een multiscale karakter. Het pakket Multiscale Fenomenen en Technieken wordt gecoördineerd door het Eindhoven Multiscale Institute.

Het pakket biedt een selectie van 4 vakken, Inleiding Asymptotische Technieken, Statistical Mechanics and Molecular Simulation, Multiscale Fluid Mechanics en Strength and Sctructure, waarvan studenten er in overleg met de coördinator tenminste 3 kiezen, op basis van hun voorkennis en verdere planning.

Multiscale Fluid Mechanics

Het macroscopisch gedrag van veel stromingen wordt sterk bepaald door onderliggende microscopische fysische processen, bijvoorbeeld in meerfasen reactoren zoals wervelbedden en bellenkolommen. De nauwkeurigheid van computersimulaties van zulke stromingen is primair afhankelijk van een juiste microscopische beschrijving van impuls-, warmte- en stofoverdracht. Dit vak behandelt drie belangrijke simulatietechnieken voor multiscale stromingsproblemen: Directe numerieke simulatie, discrete elementen methoden en continuüm-gebaseerde methoden. Het vak behandelt eerst de basisprincipes en de model vergelijkingen die nodig zijn om de simulatiemethoden te begrijpen. Het tweede deel richt zich op een toepassing van de methoden op verééénvoudigde modellen door de student zelf.

Statistical Mechanics and Molecular Simulation

Op microscopische schaal spelen zich allerlei fysische processen af die grote gevolgen hebben voor de eigenschappen van materialen op macroscopische schaal. Denk bijvoorbeeld aan fase-overgangen, zoals het koken van water (bij 100°C) of het verlies van magnetisme van ijzer (bij 770°C). Computersimulaties van dergelijke processen zijn gefundeerd in de statistische mechanica, de microscopische wiskundige beschrijving van de warmteleer. In dit vak maken studenten kennis met de twee belangrijkste microscopische simulatie methoden: Monte Carlo Sampling en Moleculaire Dynamica. Het eerste deel van het vak beslaat de basisprincipes van de statistische mechanica die nodig zijn om deze simulatiemethoden te begrijpen. In het tweede deel worden beide methoden uitgewerkt aan de hand van eenvoudig te simuleren voorbeelden die de student zelf in de praktijk kan brengen.

Strength and Structure

Bij het ontwerpen van een product is het belangrijk om te weten waar, wanneer en hoe een materiaal faalt. Denk bijvoorbeeld aan toepassingen in energy engineering (faalgedrag van windturbinebladen of batterijen), automotive engineering (energie absorbtie bij crashes), of biomedical engineering (protheses of in-body devices). Om faalgedrag kwantitatief te beschrijven, worden computersimulaties gebruikt. Het vak S&S richt zich op twee belangrijke aspecten van zulke simulaties: implementatie van plastische vervorming in 3D macroscopische (continuüm) materiaalmodellen, en multiscale modelleren van materialen, gericht op het koppelen van macroscopisch gedrag van materialen aan processen die plaatsvinden in de microstructuur. Het vak maakt duidelijk dat het begrijpen en kwantificeren van onderliggende microscopische processen verklaart waar, wanneer en hoe een materiaal macroscopisch plastisch faalt.

Neem voor meer informatie contact op met:
Prof.dr.ir. Harald van Brummelen (coördinator)
e.h.v.brummelen@tue.nl / emi@tue.nl
www.tue.nl/emi

TU/e Technische Universiteit Eindhoven University of Technology

Eindhoven Multiscale Institute