Technische Universiteit Eindhoven University of Technology

Multiscale fenomenen en technieken

Aangeboden door:	Faculteiten Wtb, TN, ST en Wsk
Taal:	Nederlands
Doelgroep:	Wtb, TN, ST en Wsk (primair) en BMT, Bk, EE (secondair)
Contactpersoon:	prof. dr. ir. E.H. van Brummelen (E.H.v.Brummelen@tue.nl)

Inhoud en samenstelling

Reductionisme is een van de basisprincipes van exacte wetenschappen: om begrip te krijgen van een complex systeem (materialen, processen, etc.), wordt dit systeem opgedeeld in kleinere onderdelen, die vervolgens apart beschouwd kunnen worden. De kracht van reductionisme is het recursieve karakter: als de componenten op hun beurt te complex blijken, kan men deze weer verder opdelen. Dit proces kan voortgezet worden tot men simpele componenten over houdt. Vier voorbeelden van reductie van een complex systeem zijn:

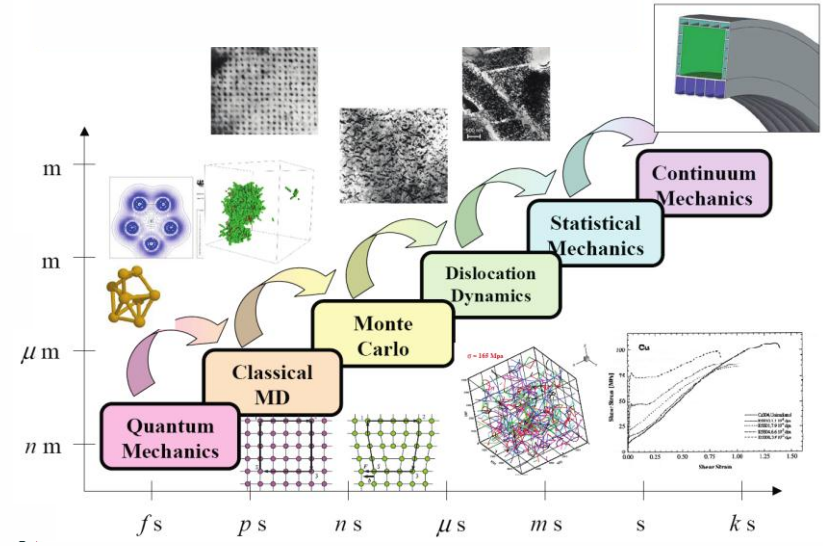
1. materiaal - kristal - molecuul - atoom
2. organisme - orgaan - weefsel - cel - molecuul
3. menigte - individu
4. land - stad - wijk - gebouw

Zie ook onderstaande figuren van weefsel, een menigte en een wijk.

De bruikbaarheid van de reductionistische aanpak neemt af naarmate het aantal componenten toe neemt. Een typische eigenschap van veel systemen is echter dat ze zogenaamd emergent gedrag vertonen: om het gedrag van het complete systeem te beschrijven, is het niet nodig om het gedrag van de onderliggende componenten precies te kennen. Dit is kernachtig samengevat in de uitspraak "More is different" van Nobel prijs winnaar P.W. Anderson.

Emergent gedrag wordt veroorzaakt doordat de componenten van een complex systeem veelal gedrag vertonen op lengte- en tijdsschalen die vele malen kleiner zijn dan die van het oorspronkelijke systeem; zie onderstaande figuur. Door dit zogenaamde *multiscale gedrag*, is alleen het "gemiddelde" van de kleine componenten belangrijk.

Technische Universiteit
Eindhoven
University of Technology



Het coherente keuze pakket *Multiscale Fenomenen en Technieken* is een interfacultair pakket, gericht op studenten van Werktuigbouwkunde, Technische Natuurkunde, Scheikundige Technologie en Wiskunde (primair) en studenten van Bouwkunde, Electrical Engineering en Bio-Medische Technologie (secundair). Het doel van dit pakket is studenten bekend te maken met het fundamentele verschijnsel "multiscale", met bijbehorende fenomenen in verschillende toepassingen en met speciale modellerings- en rekentechnieken voor problemen met een multiscale karakter.

Het pakket biedt een aantrekkelijke selectie van 4 vakken, waarvan studenten er in overleg met de coördinator tenminste 3 kiezen, op basis van hun voorkennis en verdere planning. Het eerste vak, *Inleiding Asymptotische Technieken,* betreft een vak waarin de benodigde wiskundige basiskennis wordt behandeld om multiscale problemen te kunnen begrijpen, modelleren en analyseren. Het tweede vak, *Multiscale Fluid Mechanics*, behandelt multiscale fenomenen in stromingen. Het derde vak, *Statistical Mechanics and Molecular Simulation*, gaat in op de beschrijving van de relatie tussen moleculaire modellen en continuüm modellen door middel van kansen en op het simuleren van moleculaire processen met behulp van computers. Het vierde vak, *Strength and Structure,* richt zich op multiscale fenomenen in vaste stoffen.

Vakcode	Vaknaam	Rooster (Kwartiel/Slot)
	Inleiding asymptotische technieken	Kwartiel 1 / Slot E
	Multiscale fluid mechanics	Kwartiel 2
	Statistical mechanics and molecular simulation	Kwartiel 3
4LB00	Strength and structure	Kwartiel 4 / Slot A

Maart 2013

Technische Universiteit Eindhoven University of Technology

Beschrijving vakken

Inleiding Asymptotische Technieken

Een model (in de natuurwetenschappen) is de mathematische concretisatie van de manier waarop wij (voor een gegeven probleem) de werkelijkheid zien. Een model bestaat uit een beschrijving van minimale elementen, en hun relaties. Een goed model bevat alleen de relevante, en zo weinig mogelijk de onnodige en complicerende, componenten.
Modelleren is een proces waarin we eerst een ruw, intuïtief model maken en vervolgens daarbinnen verfijnder gaan selecteren wat belangrijk en wat onbelangrijk is. Dat doen we door te onderscheiden wat (in een of andere zin) “klein” en wat “groot” is. Niet voldoende maar wel noodzakelijk hiervoor is de in ons model voorkomende grootheden te schalen op de inherente lengte, tijd, etc. eenheden. (Dit is een vorm van dimensieloos maken.) De resulterende dimensieloze parameters zeggen ons dan iets over de belangrijke en onbelangrijke effecten. Soms zijn in een probleem meerdere, ver uit elkaar liggende schalen te onderscheiden die toch beide belangrijk zijn. Bijvoorbeeld: de moleculaire schaal waarop moleculen door botsen en beweging energie uitwisselen, en de macroscopische schaal waarop deze uitwisseling zich aan ons toont als diffusie; de dunne grenslaag van een stroming waar de viskeuze effecten zich concentreren en de hoofdstroming; de langzaam variërende atmosfeer en de snel fluctuerende lichtgolf die erdoor afbuigt.
We kunnen een model maken dat alleen de ene schaal beschrijft en het effect van de andere schaal als modelaanname. In een “multiscale” aanpak kijken we naar beide schalen en hun koppeling.
Essentieel voor het vak is daarom begrip van schalen en het effect van grote en kleine parameters. Het rekenen met grote of kleine parameters heet asymptotiek, of asymptotische analyse. Het modelleren aan de hand van kleine of grote parameters heet storingsrekening.

Multiscale Fluid Mechanics

Op microscopische schaal spelen zich allerlei fysische processen af die grote gevolgen hebben voor de eigenschappen van stromingsgedrag op macroscopische schaal. Denk bijvoorbeeld aan meerfasen reactoren zoals wervelbedden en bellenkolommen. Computersimulaties van dergelijke processen hangen sterk af van een juiste microscopische beschrijving van impuls-, warmte en stofoverdracht. In dit vak wordt kennis gemaakt met drie belangrijke simulatiemethodes: directe numerieke simulatie, discrete elementen modeleren en continuüm modelleren. Het eerste deel van het vak beslaat de basisprincipes van het opstellen van de model vergelijkingen die nodig zijn om deze simulatiemethoden te begrijpen. In het tweede deel worden de methoden uitgewerkt aan de hand van eenvoudig te simuleren voorbeelden die de student zelf in de praktijk kan brengen.

Technische Universiteit Eindhoven University of Technology

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 wordt kennis gemaakt met de twee belangrijkste microscopische simulatiemethodes: 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

Tijdens het ontwerpproces van een product is het van cruciaal belang om te weten waar, wanneer en hoe een materiaal faalt. Je kunt hierbij denken aan toepassingen in automotive (energie-absorptie bij crash), energie (faalgedrag van windturbinebladen, batterijen) of microsystemen (flexibele electronica) of biomedisch (protheses, in-body devices) of veiligheid (gelaagd en/of kogelvrij glas), maar ook aan levensduurvoorspelling van belaste en dragende constructies.

Teneinde faalgedrag kwantitatief te beschrijven, maken we gebruik van computersimulaties en besteden we in dit vak vooral aandacht aan de twee meest relevante aspecten. Ten eerste leer je hoe plastische vervorming wordt geïmplementeerd in 3D macroscopische (continuüm) materiaal-modellen (in essentie is dit een voortzetting van hetgeen je geleerd hebt, in 1D, bij het vak Solid Mechanics). Het tweede aspect betreft het multi-scale modelleren van materialen, gericht op het koppelen van macroscopisch gedrag aan processen die plaatsvinden in de microstructuur. Je zult inzien dat het begrijpen en kwantificeren van deze onderliggende processen verklaart waar, wanneer en hoe een materiaal macroscopisch plastisch faalt. En belangrijker nog, hoe je dat kunt voorkomen.