

Science Blog – Research shapes the future

Binární Alloy tuhnutí

Original: <http://www.math.utk.edu/~vasili/va/descr/bas/>

V. Alexiades – UTK a ORNL

Zpracování tuhnutí je oblast velkého technického významu v materiálových věd (růst krystalů, keramiky, polymery, svařování), v geologii (vulkanických systémů, kůry magmat, rudních ložisek), stejně jako v oblasti energetiky a environmentálních věd (latentního tepla Thermal Energy Storage in situ vitrifikace).

Vyvíjíme komplexní matematické a výpočetní nástroj schopný modelování tavení a tuhnutí vícesložkové systémy, jako jsou kovové slitiny, polymerních směsí a geologických magmas. Plně spojený a robustní model bude integrovat termochemie s přenosu tepla a hmoty v 3-rozměry.

Takový nástroj může být použit k simulaci složité a drahé a nebezpečné, nebo dokonce technicky a finančně proveditelné experimentů, včetně zahrnují vysokoteplotní materiály, kontaminovaných materiálů nebo microgravity prostředí.

Kromě toho umožňuje přímé simulaci těchto procesů, účinný přímý proces simulátor je předpokladem nástroj v identifikaci parametru (inverzní) problémů, jakož i pro stanovení citlivosti na různé parametry, jež se podílejí na procesech.

Obecný rámec pro model je slabá formulace příslušných zákonů zachování tepla a přenos hmoty, doplněné o konstitutivní zákony pro toky, a tepelnými stavových

rovnice pro každou fázi, které se týkají energií proměnných (složení, teplota, tlak) charakterizující lokální termodynamické stav.

Srdcem našeho modelu, a Unikátním rysem našeho přístupu, je právě rozvoj a efektivní využívání takového obecný výraz pro energii. Výraz je přímo odvozen z, a tak plně v souladu s, termodynamiku, kódující termochemie systému a jeho fázových přechodů, a tím umožnit termodynamicky konzistentní zpracování ústavních podchlazení a segregace účinky. Se těchto prostředků (blízký k šoku-zachycení dynamiky plynů) se stane možné účinně numericky simulovat celý proces.

Současná verze modelu zohledňuje vodivý přenos tepla, spolu s difuzním přenosu hmoty, pro binární systém, s termodynamicky konzistentní zacházení s ústavními supercooling efektů a termofyzikálních vlastností v závislosti na složení a teplotě. A 2-rozměrný realizace byla paralelizovat prostřednictvím doménového rozkladu a předávání zpráv. Že byl úspěšně aplikován na infračervený detektor slitiny rtuti Kadmium-Telluride, jakož i Diopsid-anortitu a živcový pyroxene magmas. Začlenění konvekce v tavenině je ve vývoji.

... Zpět na [Alexiades-Math.Dept stránku](#) ... nebo [Alexiades non-oficiální stránku](#)
...

 16.02.2017  editor