

Simulación computacional de materiales mediante técnicas multiescalas

Director: Dr. Pablo Sánchez.

En la presente línea de trabajo se estudian y proponen nuevas formulaciones multiescala para el modelado computacional de materiales heterogéneos, con aplicaciones diversas en ingeniería: problemas mecánicos, térmicos, acústicos, etc.

La metodología a desarrollar considera la existencia de dos escalas físicas, con longitudes características bien diferenciadas: (i) la escala macroscópica o escala estructural y (ii) la escala micro/meso-mecánica, en la cual es apreciable la heterogeneidad y micro-estructura material.

En la escala macro se resuelven las ecuaciones clásicas de balance, mientras que la escala micro se modela a través del concepto de *Elemento de Volumen Representativo (EVR)*, permitiendo de esta forma llevar en cuenta la compleja interacción entre los constituyentes micro-mecánicos del material (diferentes materiales, inclusiones de partículas, fibras, poros, reacciones químicas, etc.). El acoplamiento entre las escalas involucradas se pone de manifiesto al postular mecanismos de transferencia de información entre éstas (procesos duales de *localización-homogeneización*).

Este tipo de aproximación multiescala se utiliza como plataforma teórica de base para abordar dos paradigmas de modelado diferentes y complementarios: (i) análisis y caracterización del material, suponiendo conocida su micro-estructura y (ii) sensibilidad de la respuesta macroscópica ante cambios en la topología de la micro-estructura, abriendo las puertas al diseño mismo del material para obtener una respuesta macro predefinida.

Ambos enfoques representan verdaderos desafíos conceptuales en el contexto de materiales heterogéneos, dada la complejidad del problema y las limitaciones que presentan las contribuciones documentadas hasta el presente. Puede argumentarse entonces que los estudios a conducir en el seno del proyecto poseen un alto grado de relevancia científica y originalidad.

Los desarrollos a nivel teórico deben traducirse a modelos y algoritmos computacionales, aplicando técnicas numéricas basadas en el método de elementos finitos. Para ello se prevé el desarrollo de software de alto desempeño basado el cálculo distribuido.