

Tesista: Marco Dondero

Ingeniero en Materiales. Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata (UNMDP)

Título al que aspira: Doctor en Ciencia de Materiales, UNMDP

Tema: "Diseño computacional de materiales micro y nanoestructurados para transporte de calor y masa"

Director de Tesis: Dr. Adrián Cisilino

Co-director de Tesis: Dr. Juan Pablo Tomba

Lugar de Trabajo: INTEMA, División Soldadura, Facultad de Ingeniería, UNMDP

Fecha de Defensa: 12 de abril de 2013

Jurados: Dr. Jorge D'Elía (Universidad Nacional del Litoral)

Dra. Claudia Sarmoria (Universidad Nacional del Sur)

Dr. Hugo López Montenegro (Universidad Nacional de Mar del Plata)

Resumen de la Tesis:

El control de las propiedades de transporte a través de sistemas heterogéneos tiene importancia tecnológica. La importancia de materiales nano y micro-heterogéneos como los metales y cerámicas granulares, o las espumas poliméricas de celda abierta se encuentra en sus aplicaciones tales como el aislamiento de alto rendimiento, los lechos rellenos, los catalizadores heterogéneos, los materiales compuestos y la pulvimetalurgia entre otras.

Esta tesis trata sobre el desarrollo y aplicación de herramientas computacionales y técnicas experimentales para la evaluación de las propiedades efectivas macroscópicas de transporte de materiales micro y nano estructurados, y para el diseño de sus micro y nano estructuras con el fin de obtener propiedades macroscópicas a medida.

El trabajo comienza con una revisión y análisis de los modelos analíticos y métodos computacionales disponibles para el cálculo de propiedades efectivas de materiales heterogéneos. Como resultado, se selecciona el Método de los Elementos de Contorno (BEM) como herramienta de cálculo. Esta selección se basa sobre el alto grado de precisión del método, y su versatilidad para la construcción y discretización de los modelos. El desarrollo de la tesis requiere la implementación de tres versiones del método para resolver problemas de potencial: el BEM acelerado con el Método Rápido de Multipolos (FMBEM), el BEM de bajo requerimiento de memoria y BEM para estado transitorio. Todas ellas se verifican con problemas matemáticos con solución analítica.

El FMBEM logra una velocidad de hasta 14 veces la del BEM directo y se utiliza para los análisis estadísticos y la optimización de microestructuras. Se presenta, de manera novedosa, una implementación efectiva del método BEM con bajo requerimiento de memoria con ahorros de hasta el 97% de memoria. Se implementó el BEM para estado no estacionario. Los dos últimos se utilizan para el diseño y calibración de experimentos.

Se desarrolla y pone a punto una herramienta numérica computacional eficiente para el diseño de la microestructura de materiales heterogéneos utilizando Algoritmos Genéticos (AG) y Elementos de Volumen Representativo (EVR) con el FMBEM. Atendiendo al alto costo computacional de los AG, se la implementó en paralelo para su ejecución en un clúster de PCs.

Se aplica la herramienta de optimización al diseño de materiales modelo bidimensionales micro-porosos tipo espuma formados por una distribución aleatoria de agujeros circulares aislados, con conductividad térmica variada gradualmente. La efectividad de la metodología se demuestra para dos ejemplos, alcanzándose topologías de microestructuras factibles para ambos casos. Las predicciones numéricas son experimentalmente validadas mediante experimentos diseñados ex profeso, donde los campos de temperaturas se midieron haciendo uso de una cámara termográfica. La metodología propuesta es flexible y versátil, ya que es capaz de explicar ambos, los detalles geométricos y topológicos de la microestructura del material y puede ser fácilmente extendida para tratar con inclusiones con orientaciones y formas arbitrarias y funciones objetivo multidimensionales.

La tesis luego se enfoca en el estudio de las propiedades anisótropas efectivas de materiales heterogéneos con inclusiones esbeltas. Se evalúa la difusividad utilizando el método directo y la homogenización asintótica para varias estrategias para implementar el cálculo. Se encuentra que la homogenización asintótica es la metodología más robusta para tratar los efectos de borde que ocurren en las muestras que contienen inclusiones esbeltas. Al mismo tiempo, la homogenización asintótica requiere de un EVR de menor tamaño.

Se realiza un detallado análisis numérico y teórico de la difusividad en materiales con disposiciones regulares e irregulares de las inclusiones. Se estudia la influencia de la estructura de los materiales anteriormente mencionados sobre la tortuosidad del camino de difusión. Se propone un método numérico original para calcular la longitud del camino de difusión que permite verificar los modelos analíticos de tortuosidad en bibliografía. Adicionalmente, se propone un modelo analítico de tortuosidad a partir de las predicciones del cálculo numérico y de conceptos de un modelo de bibliografía, lográndose dos versiones del modelo que sirven para predecir la tortuosidad en materiales regulares e irregulares respectivamente. Se analiza la influencia de la orientación utilizando un parámetro de orden, que sirve para contrastar con un modelo de literatura no verificado anteriormente, encontrándose una variación distinta a la predicha por ese modelo.

Finalmente, se presenta una metodología experimental original para el estudio y control de los efectos de barrera en materiales con microestructuras modelo que consiste en una matriz homogénea de PDMS con obstáculos impenetrables, representados por huecos tallados con laser, usando microscopía Raman confocal para medir la concentración del penetrante 1-octadecanol al difundir. La discriminación espacial de la microscopía confocal no sólo es adecuada para realizar un análisis local, sino también medidas globales. La versatilidad de la combinación de las herramientas

experimentales y numéricas permite abordar no sólo el análisis de microestructuras heterogéneas como ha sido el caso en este trabajo, sino también nuevas familias de materiales avanzados, como por ejemplo, microestructuras variadas gradualmente.

Summary:

The control of the transport properties across heterogeneous systems has technological importance. The importance of micro-and nano materials such as metals and heterogeneous granular ceramics, or open cell polymeric foams are in applications such as high-performance insulation, packed beds, heterogeneous catalysts, composite materials and powder metallurgy among others.

This thesis is about the development and application of computational tools and experimental techniques for evaluating the effective macroscopic transport properties of micro and nano structured materials, and for the design of micro and nano structures in order to obtain tailored macroscopic properties.

The work begins with a review and analysis of the analytical models and computational methods available for calculating effective properties of heterogeneous materials. As a result, the boundary element method (BEM) is selected as a calculation tool. This selection is based on the high degree of accuracy of the method, and versatility for construction and discretization of the models. The development of the thesis requires the implementation of three versions of the method to solve potential problems: the Fast Multipole BEM (FMBEM), the BEM with low memory requirements and the BEM for transient state. All of them are verified with mathematical problems with analytical solution.

The FMBEM achieves a speed up of 14 times that of the direct BEM and is used for statistical analysis and optimization of microstructures. It is presented an effective implementation of the BEM with low memory requirements with savings of up to 97% of memory. The BEM for unsteady state was implemented and used, along with the latter, for the design and calibration of experiments.

A computationally efficient numerical tool for designing heterogeneous materials microstructure using Genetic Algorithms (GA) and representative volume elements (VRE) with FMBEM is developed and perfected. Abiding to the high computational cost of the AG, it was implemented in parallel to run on a cluster of PCs

The optimization tool is applied to design micro-porous foam-type model-materials formed by a random distribution of isolated circular holes, with gradually varying thermal conductivity. The effectiveness of the method is demonstrated for two examples, achieving microstructures topologies feasible for both cases. The numerical predictions are validated by experiments specifically designed where temperature fields were measured using a thermal imager. The proposed method is flexible and versatile, since it can explain both the geometric and topological details of the microstructure of the material and can be easily extended for dealing with inclusions with arbitrary shapes and orientations and multidimensional objective functions.

The thesis then focuses on the study of anisotropic effective properties of heterogeneous materials with slender inclusions. Diffusivity is evaluated using the direct method and the asymptotic homogenization for various strategies to implement the calculation. It is found that the asymptotic homogenization is a more robust methodology for treating the edge effects that occur in the samples containing slender inclusions. Simultaneously, the asymptotic homogenization requires a smaller EVR.

A detailed theoretical and numerical analysis of the diffusivity in materials with regular and irregular arrangements of inclusions is performed. The influence of the structure of the mentioned materials on the tortuosity of the diffusion path is studied. An original numerical algorithm is proposed to calculate the length of the diffusion path that allows the testing of tortuosity models found in literature. Additionally, it is proposed an analytical model of tortuosity from the predictions of numerical concepts and a literature model, achieving two versions of the model which predict the tortuosity in regular and irregular materials respectively. The influence of the orientation is analyzed using an order parameter, that serves to contrast with a model of literature not previously verified.

Finally, it is presented an original experimental methodology for studying and controlling barrier effects in materials with model microstructure consisting of a homogeneous matrix of PDMS with impenetrable obstacles represented by hollow carved with laser, using confocal Raman microscopy to measure the concentration 1-octadecanol penetrant when diffusing. The spatial discrimination of confocal microscopy is suitable not only for local analysis but also for global measures. The versatility of the combination of experimental and numerical tools can address not only the analysis of heterogeneous microstructures as has been the case in this work, but also new families of advanced materials, such as gradually varied microstructures.