

Plan de Gestión de Datos

INFORMACION SOBRE EL PROYECTO
1. – Título del Proyecto
- Título del Proyecto (en castellano)
Desarrollo de un modelo multiescala para el análisis de la degradación asistida de materiales policristalinos debido a agentes ambientales
- Título del Proyecto (en inglés)
Multi-scale model development for the analysis of the assisted degradation of polycrystalline materials due to environmental agents
-Descripción del Proyecto (en castellano) Resumen
<p>Este proyecto propone estudiar la degradación mecánica y la fractura de materiales policristalinos asistida por agentes ambientales (“<i>Environmentally Assisted Cracking</i>”, EAC). El estudio tendrá en cuenta los fenómenos químicos-mecánicos asociados a dicha degradación en dos escalas de longitud bien diferenciadas, la escala estructural y la del tamaño del grano, y los acoples entre ellas.</p> <p>Este trabajo consistirá en una resolución multifísica (fisuramiento mecánico y difusión del agente corrosivo) que utilice técnicas multiescalas variacional y termodinámicamente consistentes, basadas en el concepto de existencia de un volumen representativo elemental (“<i>Representative Volumen Element</i>”, RVE). Se formulará el desarrollo teórico correspondiente e implementarán las estrategias numéricas necesarias para la solución de este tipo de problemas EAC. Para ello será necesario disponer de un adecuado modelo teórico multifísica del problema EAC (incluyendo los fenómenos de adsorción y absorción del soluto en la red del sólido anfitrión, difusión del agente corrosivo influenciado por el estado mecánico del material y el efecto de fractura y fragilización del sólido debido a dicho soluto). La herramienta computacional desarrollada tendrá un enfoque modular, con capacidad para incorporar físicas adicionales en el futuro.</p> <p>El proyecto tendrá un impacto tecnológico y económico elevado en los sectores automotriz, aeroespacial, marítimo, petrolero, y muy principalmente en el pujante campo de la economía del hidrógeno.</p>
-Descripción del Proyecto (en ingles) Resumen
<p>This project proposes to study the mechanical degradation and fracture of polycrystalline materials assisted by environmental agents (“<i>Environmentally Assisted Cracking</i>”, EAC). The study will consider the chemical-mechanical phenomena associated with such degradation at two different length scales, the structural and the grain size scales, and the couplings between them.</p> <p>This work will consist of a multiphysics resolution (mechanical cracking and corrosive diffusion) using variationally and thermodynamically consistent multiscale techniques based on the concept of the existence of a “<i>Representative Volume Element</i>” (RVE). The corresponding theoretical development will be formulated and the necessary numerical strategies for the solution of this type of EAC problems will be implemented. This will require an adequate multiphysical theoretical model of the EAC problem (including the phenomena of adsorption and absorption of the solute in the host solid network, diffusion</p>

of the corrosive agent influenced by the mechanical state of the material, and the effect of fracture and embrittlement of the solid due to the solute). The developed computational tool will have a modular approach with the possibility to incorporate additional physics in the future.

The project will have a high technological and economic impact on the automotive, aerospace, marine, and oil sectors, especially in the booming field of the hydrogen economy.

-Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en castellano)

Multiescala RVE, fractura,
degradación asistida, materiales
policristalinos, hidrógeno

- Palabras Clave descriptivas del Proyecto (en ingles)

RVE multi-scale, cracking,
assisted degradation,
polycrystalline materials,
hydrogen

2 – Datos del Director/ar del Proyecto

- Nombre y Apellido

Sebastian Toro

- Unidad Académica

CIMEC – CONICET-UNL

- Teléfono oficial de contacto

+54-342-4511594/95 Int. 7045

-Teléfono movil de contacto

+54-9-342-4305486

-E-mail del Director/a del Proyecto

storo@unl.edu.ar

DATOS RESULTANTES DE LA EJECUCIÓN DEL PROYECTO

-Describa la toma de muestras / datos a realizar

Este proyecto está orientado al desarrollo y resolución computacional, por lo que no realiza toma de muestras (de carácter experimental) pero genera diferentes tipos de datos como los indicados a continuación:

- Códigos fuentes de las herramientas computacionales desarrolladas: durante la realización del proyecto se debe implementar el código computacional que permitirá la resolución del problema completo, que incluye la etapa de preproceso (lectura de datos del problema a resolver, tratamiento de estos e inicialización de las variables del problema), resolución (resolución numérica del problema mediante métodos iterativos y solución de ecuaciones lineales) y postproceso (cálculo adicionales a partir de resultado primario, que en el caso de este proyecto es los valores nodales de los desplazamiento, salto y concentración de soluto, para su visualización y almacenamiento en archivos en formato texto o binario). Además de este código principal, se genera varios scripts adicionales, como por ejemplo para la resolución analítica o numérica de casos más simples, procesamiento posterior de los resultados para su análisis (como ploteo de gráficas, etc.), etc. Los códigos generados se almacenan localmente en la computadora de uso o en repositorios remotos (como GitHub y BitBucket).
- Resultados obtenidos durante la resolución del problema: Cada vez que se realiza una simulación, se almacena los resultados en archivos, que puede tener formato texto (código ASCII) o en formato binario (los números se almacenan directamente sin convertirlos en código ASCII). La estructura de almacenamiento del archivo puede ser una propuesta para el caso o utilizando formatos existentes (MAT, VTK, HDF5, XML). Por cuestiones de espacio de memoria de almacenamiento, se los comprime en formato ZIP o RAR. También, a veces, debido a que los archivos pueden resultar de tamaños muy grandes y gran cantidad de simulaciones que se realizan, o en algunos

casos el resultado no fue el esperado, los archivos resultantes de la simulación se eliminan, conservando los análisis posteriores y gráficas sobre los datos obtenidos.

- Ejemplos para validación: En el proceso de resolución del proyecto, se realizan hipótesis, se proponen formulaciones, modelos y estrategias numéricas, y se implementan los códigos computacionales, que se deben verificar y validar a partir de contrastar diferentes parámetros y gráficas. Para ello se buscan ejemplos de validación en la bibliografía existente, que puede ser de base experimental o numérica. También se generan ejemplos de validación propios a partir de simulaciones numéricas, que además sirven de casos test para posteriores modificaciones en los códigos computacionales. Con estos se genera una base de datos de ejemplos de validación que se conserva durante el proyecto.

– Datos: ¿Existe alguna razón por la cual los datos declarados no deban ser puestos a disposición de la comunidad / ser de acceso público? (marque X)	
X	NO
	SI. Elija una de las opciones:
	se encuentra en evaluación de protección por medio de patentes no se inició el proceso de evaluación de patentabilidad, pero podría ser protegible existe un contrato con un tercero que impide la divulgación Otro. Justifique.
– Período de Confidencialidad: Es el periodo durante el cual los datos no deberían ser publicados, contado a partir del momento de la toma de los mismos. El periodo máximo para la no publicación es de 5 (CINCO) años posteriores a su obtención. Luego de este periodo, los datos estarán disponibles para la comunidad / serán de acceso público.	
Si Ud. considera que este tiempo es insuficiente, y necesita prorrogar el período de confidencialidad, indique sus motivos y la cantidad de años adicionales que considera necesarios. Marque su opción con “X”.	
	1 (UN) año
	2 (DOS) años
X	3 (TRES) años
	4 (CUATRO) año
	5 (CINCO) años
	Otro.
	Motivos: