

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



Modelado de falla de materiales mediante formulaciones multiescala

Sebastian Toro

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA
Y CIENCIAS HÍDRICAS

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN
DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

Tesis de Doctorado **2014**



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Modelado de falla de materiales mediante formulaciones multiescala

Sebastian Toro

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado
como parte de los requisitos para la obtención
del grado de

DOCTOR EN INGENIERÍA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2014

Comisión de Posgrado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Ciudad Universitaria,
Paraje "El Pozo", S3000, Santa Fe, Argentina.

Agradecimientos

Primero se quiere agradecer las instituciones que me permitieron realizar la tesis doctoral, como son el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), que me financió la beca de estudio; la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas (FICH-UNL), donde realizo el doctorado y el Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), que me ofreció un lugar de trabajo. También agradezco al grupo de personas que componen el CIMEC, por su buena disposición y consejos.

A los investigadores Pablo Blanco y Raúl Feijóo, del Laboratorio Nacional de Computación Científica (LNCC) de Brasil, y al Profesor Xavier Oliver, del Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Canales y Puertos (ETSCCPB - UPC) de Barcelona, por permitirme trabajar en conjunto con ellos.

Estoy profundamente agradecido a mis directores, Pablo Sánchez y Alfredo Huespe, por el tiempo dedicado, su buena disposición para explicar y transmitir conocimientos, por las infinitas discusiones, insistencias e interés para resolver los problemas. Está de más decir, que sin ellos este trabajo no sería posible.

A mi familia, por su constante apoyo y aliento.

Resumen

En esta tesis se estudian y desarrollan formulaciones multiescalas, variacionalmente consistentes, para el modelado de *falla* en materiales heterogéneos, utilizando para tal fin el concepto de Elemento de Volumen Representativo (RVE) juntamente con técnicas específicas de homogeneización computacional. En particular, el trabajo se limita a considerar el acoplamiento mecánico entre dos escalas de longitud diferentes, a saber:

- (i) la escala macro convencional, también denominada escala estructural;
- (ii) la escala micro (o mesoscópica, según el contexto) en la cual son observables las heterogeneidades del material (defectos, poros, fibras, inclusiones, etc).

En esta monografía se entiende el término “*modelo multiescala*” como sinónimo de “*caja constitutiva*”, en el sentido que: dada la historia de deformaciones en la escala macro, la metodología multiescala debe retornar la respuesta en tensiones, vía homogeneización del comportamiento constitutivo a nivel micro.

El uso de métodos de homogeneización para materiales que se comportan en forma estable, desde el punto de vista constitutivo, está ampliamente estudiado y difundido en la actualidad, con resultados ciertamente satisfactorios. No sucede lo mismo para aquellos materiales que incursionan en el régimen inestable como consecuencia del fenómeno de localización de deformaciones en bandas de reducido espesor, considerado el mecanismo precursor de la falla material. Típicamente, materiales caracterizados por leyes constitutivas de daño y/o plasticidad con ablandamiento son especialmente susceptibles de inducir este fenómeno. Es un hecho reconocido que al utilizar modelos multiescalas convencionales, para modelar tales materiales, no es posible encontrar un tamaño físicamente admisible de la microestructura a partir del cual la respuesta constitutiva homogeneizada resulte insensible a este tamaño, perdiéndose así la noción básica de existencia de RVE (efecto tamaño en la mecánica de fractura clásica). Este concepto se denominará a lo largo de toda la tesis como “*pérdida de objetividad*” de la respuesta homogeneizada, representando un tópico no resuelto aún en la comunidad científica, de gran interés ingenieril y desafío tanto desde el punto de vista teórico-conceptual como numérico.

La idea básica en la cual se fundamenta este trabajo de tesis es obtener un modelo mecánico macroscópico el cual, bajo ciertas condiciones críticas de degradación que tienen lugar en la microescala, pueda nuclear/propagar una fisura cohesiva macro que llevará en cuenta (en forma homogeneizada) la cinemática y el comportamiento constitutivo complejo microestructural. Desde un punto de vista mecánico se admite entonces que la cinemática macro viene caracterizada por dos campos independientes entre sí: el tensor de deformaciones clásico y el salto de desplazamiento en la fisura cohesiva. El comportamiento constitutivo del medio continuo y de la interfaz cohesiva no se definen a nivel macro sino que se obtienen mediante homogeneización. Por las razones explicadas en el párrafo anterior, la respuesta cohesiva homogeneizada en general resultará *no objetiva* si se aplican *técnicas convencionales de homogeneización*, y por lo tanto inadmisibles. Se requiere entonces una técnica de salto de escala consistente y específicamente diseñada para dotar de objetividad al modelo mecánico. Ese tópico es precisamente el punto neurálgico de la contribución presente.

El modelo propuesto está axiomática y variacionalmente formulado a partir de hipótesis fundamentales concernientes al modelado multiescala. En este sentido, nuestra formulación introduce sólo tres postulados básicos para construir las bases de la teoría multiescala completa, a saber:

- (i) un mecanismo adecuado de transferencia de información cinemática desde la escala macro hacia la escala micro (el cual resulta físicamente coherente con el proceso de falla material);
- (ii) el concepto de admisibilidad cinemática que vincula las descripciones cinemáticas a nivel macro y micro;
- (iii) la introducción de un principio variacional de equivalencia de potencias virtuales internas entre las dos escalas involucradas en el análisis.

Dado que se introducen hipótesis de tipo cinemáticas y energéticas, los esfuerzos internos (o variables conjugadas energéticamente) surgen mediante argumentos de dualidad, sin que se pueda imponer hipótesis alguna sobre éstos. En este sentido, utilizando principios elementales del cálculo, es posible obtener las consecuencias variacionales de la formulación propuesta, a saber:

- (i) la correspondiente fórmula de homogeneización para el tensor de tensiones, representativa de la parte continua del sólido macro (variable dual a la deformación macro);
- (ii) la correspondiente fórmula de homogeneización para la tracción cohesiva, representativa de la fisura nucleada macro (variable dual a la apertura de fisura macro);
- (iii) el tipo de problema de equilibrio a resolver a nivel del RVE.

El modelo mecánico propuesto brinda una solución completa que cubre todo el proceso de carga y degradación material macro, abarcando la etapa estable, la detección de inestabilidad material y la respuesta poscrítica inestable.

En la tesis se desarrolla y describe la tecnología numérica necesaria para la resolución del problema multiescala resultante, considerando el uso de elementos finitos con discontinuidades fuertes embebidas de soporte local y homogeneización numérica basada en el paradigma FE^2 . Para tal finalidad se ha desarrollado un código computacional general cuya estructura de datos está específicamente diseñada para un entorno de modelado multiescala, que soporta además cálculo distribuido.

Finalmente se presentan varios ejemplos de validación de la formulación multiescala propuesta, incluyendo comparativas frente a metodologías de tipo Simulación Numérica Directa (DNS).

Índice general

Resumen	iii
I Conceptos generales sobre el modelado de falla de materiales incluyendo metodologías multiescala	1
1. Introducción	3
1.1. Motivación	3
1.2. Estrategias multiescala para modelar materiales heterogéneos	4
1.3. Modelos multiescala basados en el concepto de RVE	6
1.3.1. El concepto de RVE	6
1.3.2. La cuestión de la existencia de un RVE	6
1.3.3. Taxonomía de modelos basados en RVE	7
1.4. Modelos monoescala para analizar falla de materiales	9
1.4.1. Modelos cohesivos	10
1.4.2. Modelos basados en la mecánica del continuo	10
1.4.3. Aproximación por Discontinuidades Fuertes del Continuo (ADFC)	11
1.5. Estado del arte en referencia al modelado multiescala de falla material utilizando un RVE	11
1.5.1. Modelos Clásicos o Multiescala Estándar	11
1.5.2. Modelos que tratan el régimen mecánico en donde los materiales muestran comportamiento inestable	12
1.6. Propuesta de una nueva formulación multiescala para la falla de materiales	13
1.6.1. Estructura de la tesis	14
II Formulación multiescala para el modelado de falla material	15
2. Modelo macro con nucleación de fisuras cohesivas	17
2.1. Generalidades	17
2.2. Premisas básicas adoptadas para el modelo en la macroescala	17
2.3. Cinemática con discontinuidades fuertes	19
2.4. Problema de equilibrio variacional en la macroescala	22
2.5. Criterio de falla en la macroescala	24
2.6. Respuesta constitutiva multiescala completa (FMOF)	25
3. Modelo multiescala para el régimen estable del material	29
3.1. Preliminares	29
3.2. Premisas básicas adoptadas para el modelo en la microescala	30
3.3. Definición Cinemática en la microescala: Hipótesis N°1	31
3.4. Admisibilidad Cinemática: Hipótesis N°2	32
3.5. Admisibilidad Energética: Hipótesis N°3	34
3.6. Respuesta mecánica homogeneizada (σ): Consecuencia N°1	34

3.7. Problema de equilibrio en la microescala: Consecuencia N°2	35
3.8. Modelo constitutivo en la microescala	36
3.9. Síntesis del procedimiento multiescala	36
3.10. Submodelos del MMCI: diferentes condiciones de borde	36
3.11. Tensor tangente constitutivo homogeneizado	38
4. Modelo multiescala para el régimen inestable del material	43
4.1. Preliminares	43
4.2. Definición Cinemática en la microescala: Hipótesis N°1	44
4.2.1. Determinación del factor de tortuosidad: α_μ	46
4.3. Admisibilidad Cinemática: Hipótesis N°2	47
4.4. Admisibilidad Energética: Hipótesis N°3	49
4.5. Respuesta mecánica homogeneizada (T): Consecuencia N°1	50
4.6. Problema de equilibrio en la microescala: Consecuencia N°2	51
4.7. Submodelos del MMCo: diferentes condiciones de borde	52
4.8. Identificación del dominio localización Ω_μ^L en la microcelda	54
III Implementación Numérica	57
5. Implementación Numérica del Modelo Macro	61
5.1. Descripción cinemática	61
5.2. Equilibrio	63
5.3. Integración numérica. Técnica de salto de escala computacional	64
5.4. Determinación de la condición de bifurcación en la macroescala	65
6. Implementación Numérica del Modelo Micro	67
6.1. Cinemática	67
6.1.1. Cinemática del campo de fluctuaciones	67
6.1.2. Ejemplos de espacios funcionales discretos para submodelos del MMCI y del MMCo	68
6.1.3. Tratamiento numérico de las restricciones cinemáticas	69
6.2. Resolución del problema de equilibrio no lineal discreto en la microescala	73
6.2.1. Particionamiento de los grados de libertad y condensación estática de la matriz de condiciones de borde	73
6.2.2. Estrategia para la resolución del sistema de ecuaciones del problema de elementos finitos	74
IV Ejemplos Numéricos	77
7. Modelo Multiescala aplicado a problemas Microestructurales	81
7.1. Preliminares	81
7.1.1. Configuración general de los ejemplos	81
7.2. Microestructuras con bandas de localización homogéneas	83
7.2.1. Caso (a): Bandas de localización horizontales	83
7.2.2. Caso (b): Bandas de localización inclinadas	86
7.3. Microestructuras con bandas de localización no homogéneas	88
7.4. Microestructuras con poros circulares	90
7.5. Respuesta cohesiva homogeneizada en un proceso de carga y descarga	92
7.6. Micro estructura periódica porosa: aplicación de diversos submodelos multiescala	92
7.6.1. Descripción microestructural	93
7.6.2. Condiciones de carga en las microceldas (deformaciones macro impuestas)	93

7.6.3.	Análisis del modo de deformación localizado obtenido con diferentes submodelos multiescala (MMCI)	94
7.6.4.	Análisis de objetividad de la respuesta durante el régimen inestable material utilizando el modelo MMCo	97
8.	Modelo multiescala aplicado a problemas Macro-Micro acoplados	103
8.1.	Preliminares	103
8.2.	Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios	104
8.2.1.	Descripción	104
8.2.2.	Resultados	105
8.3.	Viga entallada simplemente sustentada en modo flexión (SENB: Single-Edge Notched Bending test)	107
8.3.1.	Descripción de la microestructura material	107
8.3.2.	Modelos numéricos	111
8.3.3.	Energía de fractura homogeneizada obtenida utilizando el modelo FMOF	111
V	Conclusiones	115
9.	Conclusiones	117
9.1.	Discusión y aportes a nivel de la Formulación Mecánica Multiescala	117
9.1.1.	Características esenciales de la metodología propuesta	118
9.2.	Discusión y aportes a nivel de la Implementación Numérica	119
9.2.1.	Escala micro	119
9.2.2.	Escala macro	120
9.2.3.	Interfaz macro-micro	120
9.2.4.	Resumen	121
9.3.	Discusión y aportes a nivel de Resultados Numéricos	122
9.4.	Trabajos científicos derivados	122
9.5.	Líneas de investigación a futuro	124

Índice de figuras

1.1. Estrategias multiescalas basadas en la noción de RVE. La magnitud ℓ representa la longitud característica de la macroescala, mientras que ℓ_{RVE} es la longitud característica de la microcelda o RVE.	8
1.2. Esquema conceptual de modelo cohesivo para representar fractura.	10
1.3. Esquema de mecánica asumido en la formulación propuesta para el tratamiento de falla material mediante multiescala.	14
2.1. Esquema idealizado del modelo multiescala (macro-micro) para falla material, utilizando el concepto de RVE.	19
2.2. Ingredientes básicos y nomenclatura para describir una cinemática con discontinuidades fuertes sobre \mathcal{S}	20
2.3. Cinemática con discontinuidades fuertes de soporte compacto.	21
2.4. Esquema de la respuesta constitutiva completa para la formulación multiescala propuesta (FMOF).	27
3.1. Esquema de microcelda en régimen estable del material.	31
3.2. Ejemplos de microceldas con condiciones de borde periódicas clásicas (MMCI).	38
4.1. Esquema de microcelda en régimen inestable del material.	43
4.2. Subdominio con localización de deformaciones micro Ω_μ^L junto con sus características geométricas: \mathcal{S}_μ , $\ell_\mu(\mathbf{y})$ y $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$	45
4.3. <i>Restricciones Cinemáticas Mínimas</i> (condiciones de borde) a imponer sobre la microcelda: (a) <i>Modelo Multiescala Clásico</i> (MMCI), (b) <i>Modelo Multiescala Cohesivo</i> (MMCo).	49
4.4. Subdominio de localización Ω_μ^L para diferentes tipos de microestructuras heterogéneas: (a) Zona compuesta completamente de material con ablandamiento, (b) Zona compuesta de material con ablandamiento y una pequeña zona de un material elástico (suficientemente flexible), (c) Zona compuesta de material con ablandamiento y parte de un poro.	55
5.1. Técnica de elementos finitos con discontinuidades fuertes embebidas de soporte local, a nivel de la macro escala: (a) Función de forma enriquecida, $\mathcal{M}_\mathcal{S}^e$, para el modo discontinuo, (b) Dominio \mathcal{Q} discretizado con una malla de elementos finitos utilizando la metodología E-FEM.	64
6.1. Microcelda de dominio Ω_μ y malla de elementos finitos con condiciones de borde periódica clásica (vínculo rígido).	70
6.2. Microcelda con dominio Ω_μ y malla de elementos finitos con incrementos de deformaciones fluctuantes de media nula, sobre la región $\check{\Omega}_\mu$ con límites dados por la curva $\check{\Gamma}_\mu$	72
6.3. Microcelda de dominio Ω_μ y discretización de elementos finitos. Condiciones de borde híbridas.	73

- 6.4. Ejemplos típicos de restricciones cinemáticas para diferentes submodelos de RVE, abarcando diferentes clases y particiones de grados de libertad: a) Submodelo lineal; b) Submodelo periódico generalizado, con las flechas indicando la dirección de la periodicidad; c) Modelo de mínima restricción cinemática; d) Submodelo híbrido. 75
- 7.1. Microestructuras con bandas homogéneas de localización de deformaciones: (a) RVE₁ (3 elementos finitos en el modelo discreto), (b) RVE₂ (6 elementos finitos en el modelo discreto), (c) RVE₃ (9 elementos finitos en el modelo discreto), (d) Función $\chi(t)$ utilizada para el modelo MMCI, (e) Función $\chi(t)$ y función $\psi(t)$ utilizadas para el modelo FMOF, (f) Discretización por elementos finitos para el RVE₁. 84
- 7.2. Relación tensión-deformación homogeneizada (σ_{yy} vs. ε_{Ryy}) obtenida utilizando el modelo MMCI: (a) Ablandamiento Lineal, (b) Ablandamiento exponencial. 85
- 7.3. Respuesta cohesiva homogeneizada (T_y vs. β_y) obtenida utilizando el modelo MMCo, para $t > t_N$: (a) Ablandamiento Lineal, (b) Ablandamiento Exponencial. 85
- 7.4. Respuesta tensión-deformación homogeneizada obtenida utilizando el modelo MMCI: (a) Relación axial σ_{yy} vs. ε_{Ryy} , (b) Relación tangencial σ_{xy} vs. ε_{Rxy} 87
- 7.5. Respuesta cohesiva homogeneizada obtenida utilizando el modelo MMCo, para $t > t_N$: (a) Relación T_y vs. β_y , (b) Relación T_x vs. β_x 87
- 7.6. Microestructura con bandas no homogéneas de localización de deformaciones: (a) RVE₁ (121 elementos finitos en el modelo discreto), (b) RVE₂ (242 elementos finitos en el modelo discreto), (c) RVE₃ (363 elementos finitos en el modelo discreto), (d) Función $\chi(t)$ utilizada para el modelo MMCI, (e) Función $\chi(t)$ y función $\psi(t)$ utilizada para el modelo FMOF, (f) Discretización por elementos finitos para el RVE₁. 88
- 7.7. Respuesta constitutiva homogeneizada para micro estructuras con bandas no homogéneas de localización de deformaciones: (a) Relación σ_{xy} vs. ε_{Rxy} obtenida utilizando el modelo MMCI, (b) Relación T_x vs. β_x obtenida utilizando el modelo MMCo, para $t > t_N$ 89
- 7.8. Micro estructuras con poros circulares: (a) RVE₁ (720 elementos finitos en el modelo discreto), (b) RVE₂ (1440 elementos finitos en el modelo discreto), (c) RVE₃ (2160 elementos finitos en el modelo discreto), (d) Función $\chi(t)$ utilizada para el modelo MMCI, (e) Función $\chi(t)$ y función $\psi(t)$ utilizada para el modelo FMOF, (f) Discretización por elementos finitos para el RVE₁. 90
- 7.9. Respuesta homogeneizada para microestructuras porosas con bandas de localización horizontales: (a) Relación σ_{xy} vs. ε_{Rxy} obtenida usando la técnica MMCI, (b) Relación T_x vs. β_x obtenida usando la aproximación MMCo, para $t > t_N$ 91
- 7.10. Micro estructuras con bandas de localización inclinadas, sujetas a un proceso de carga-descarga. Respuesta cohesiva homogeneizada obtenida con el modelo MMCo, para $t > t_N$: (a) Relación T_y - β_y , (b) Relación T_x - β_x 92
- 7.11. Microestructura periódica porosa: (a) Definiciones geométricas, (b) Funciones $\psi(t)$ y $\chi(t)$ que definen la historia de deformación macro aplicada 93
- 7.12. Micro estructura periódica porosa: (a) Evolución de $\det(\mathbf{Q})$ para el RVE_{1x1} con condiciones de borde periódicas, (b) Relación tensión-deformación homogeneizada. Las letras en el gráfico identifican los instantes de tiempo donde se ha evaluado la función $\det(\mathbf{Q}(n, t))$. 95
- 7.13. Micro estructura periódica porosa: secuencia de RVEs para analizar los modos de localización obtenidos utilizando condiciones de mínima restricción o lineal. 95
- 7.14. Micro estructura periódica porosa: (a) Curvas de respuesta homogeneizada σ_{x_2} vs. ε_{Rx_2} para el submodelo multiescala lineal y comparativa frente a la solución periódica obtenida para el RVE_{1x1} (el punto final de cada curva representa el instante de bifurcación t_N); (b) Gráfico de error asociado a la tensión de bifurcación valuada en t_N para el submodelo lineal y submodelo de mínima restricción cinemática versus tamaño de las microceldas. . 97

7.15. Submodelos multiescala para análisis de problemas de falla. Condiciones de borde (se utiliza la misma simbología aplicada en la Sec. 6.1) sobre el campo de desplazamientos fluctuantes en la microescala. (a) Submodelo de mínima restricción para la etapa estable material, (b) Submodelo periódico clásico para la etapa estable material, (c) Condiciones periódicas generalizadas alineadas con la dirección de falla macro, (d) Condiciones de borde no estándar (CBNE) propias del modelo MMCo. 99

7.16. Malla de elementos finitos para las microceldas denotadas como $RVE_{1 \times 1}$ y $RVE_{1 \times 2}$. Subdominios de localización Ω_μ^L para ambos casos. 99

7.17. Análisis de fractura con microcelda porosa. Malla deformadas y distribución de daño de las microceldas $RVE_{1 \times 1}$ y $RVE_{1 \times 2}$, en dos etapas de análisis. 100

7.18. Componente normal y tangencial del vector tracción homogeneizado, \mathbf{T} , en función del salto en desplazamiento en la macroescala β . Curvas de respuesta para el $RVE_{1 \times 1}$ y $RVE_{1 \times 2}$. 101

8.1. Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios. (a) Detalle del elemento estructural y variables usadas en la macroescala, junto con la fisura macro nucleada \mathcal{S} . (b) Microceldas con poros elípticos aleatorios utilizadas y sus correspondientes mallas de elementos finitos. (c) Posible diagrama de las normales \mathbf{n}_μ , dominio localizado Ω_μ^L y esquema de condiciones de borde CBE aplicadas en la microescala. 104

8.2. Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios. Gráfica de la fuerza vertical total F vs. el desplazamiento vertical Δ prescrito en el extremo superior de la barra, para los RVE_1 y RVE_2 y la formulación multiescala propuesta (FMOF). 106

8.3. Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios. Evolución de la variable de daño en el RVE_1 , para distintos estados de análisis. 107

8.4. Estiramiento uniaxial de barra con micro-estructura de poros elípticos aleatorios. Evolución del criterio para la determinación del subdominio localizado Ω_μ^L , en los RVE_1 y RVE_2 108

8.5. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): (a)-(c) Malla de elementos finitos para las microceldas consideradas con diferentes grados de porosidad; (d)-(e) Descripción geométrica y malla de elementos finitos para el modelo DNS; (f)-(g) Descripción geométrica y malla de elementos finitos macro para el modelo multiescala. 110

8.6. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Esquema de condiciones de borde aplicadas al RVE. 112

8.7. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Curvas carga vs. desplazamiento vertical referida al punto P_I , obtenidas utilizando el modelo FMOF y DNS, para los diferentes niveles de porosidad f_v 112

8.8. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Respuestas cohesivas homogeneizadas referidas al punto P_{II} , obtenidas utilizando el modelo FMOF para diferentes niveles de porosidad f_v (Componente normal de la tracción \mathbf{T} vs. Componente normal del salto β). 113

8.9. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Curva Carga vs. Desplazamiento vertical referida al punto P_I obtenida utilizando el modelo FMOF, para dos discretizaciones diferentes a nivel macro. 114

Índice de tablas

1.1. Taxonomía de modelos multiescala para analizar materiales heterogéneos.	5
7.1. Módulo de ablandamiento inicial $H_{\mu 0}$, de acuerdo al modelo constitutivo adoptado. . . .	82
7.2. Propiedades materiales para las micro estructuras mostradas en la Fig. 7.1.	84
7.3. Propiedades materiales para las micro estructuras mostradas en la Fig. 7.6.	89
7.4. Propiedades materiales para las micro estructuras mostradas en la Figura 7.8.	91
7.5. Modos de deformación localizado obtenidos utilizando la aproximación MMCI considerando diferentes submodelos multiescala ($t < t_N$).	96
8.1. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB). Propiedades de los material de acuerdo a la denominación dada en la Fig. 8.5. Descripción del tipo de elemento finito utilizado.	109
8.2. Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Energía de fractura efectiva evaluada para diferentes porosidades (f_v) en Ω_{μ}^L	113

Índice de cuadros

2.1. Problema mecánico macro con discontinuidades fuertes. Conceptos básicos e ingredientes.	28
3.1. Modelo Multiescala Clásico (MMCl). Conceptos básicos e ingredientes.	41
4.1. Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo). Conceptos básicos e ingredientes.	53

Parte I

Conceptos generales sobre el modelado de falla de materiales incluyendo metodologías multiescala

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

En general, los materiales que intervienen en el diseño y análisis estructural, como en muchas otras aplicaciones importantes de la ingeniería, tienen una naturaleza intrínsecamente heterogénea. Ejemplos bien conocidos son los compuestos cerámicos con comportamiento cuasi-frágil, suelos, laminados, aleaciones metálicas, polímeros sintéticos, tejidos biológicos (huesos, paredes arteriales), entre muchos otros. Desde un punto de vista microestructural, se pueden reconocer distintos tipos de heterogeneidades. Casos típicos son los materiales compuestos con una matriz homogénea y con inclusiones de partículas, huecos/poros, fibras de refuerzo, etc.

La existencia de una microestructura heterogénea y la interacción compleja entre los componentes microscópicos, determinan completamente la respuesta mecánica del material heterogéneo en la macroescala o escala de observación. La influencia que posee la microestructura material en la respuesta estructural adquiere aún mayor importancia en el modelado de localización de deformaciones y falla, debido a que muy probablemente estos mecanismos de degradación tomen caminos preferenciales de debilidad material existentes a nivel micromecánico. Los enfoques convencionales basados en análisis *monoescala*, revelan una capacidad limitada para capturar respuestas mecánicas sofisticadas inducidas por las heterogeneidades.

En este contexto, las formulaciones multiescala surgen como una poderosa herramienta de modelado proveyendo un marco teórico general y riguroso capaz de describir el espectro constitutivo completo de materiales heterogéneos, incluyendo la evolución de escenarios de falla y fractura complejos.

En las aproximaciones multiescala, el conjunto de ecuaciones constitutivas que describen la respuesta mecánica del material sólo deben ser definidas en las escalas de longitud más pequeña y para cada uno de los componentes. En las escalas de longitud mayores la respuesta constitutiva se deriva, mediante procesos de homogeneización adecuados, a partir de las definiciones dadas en las escalas más bajas. Esta forma de abordar el problema es particularmente útil en lo que respecta a la descripción de los mecanismos de nucleación de fisuras y propagación de fallas.

Una idea que subyace en este tipo de aproximaciones es que la descripción constitutiva a nivel micromecánico, es decir a nivel de cada una de las fases que componen la microestructura, se modele a través de leyes relativamente simples, basadas por ejemplo en modelos constitutivos convencionales adecuados y que puedan caracterizarse en forma confiable. La riqueza constitutiva obtenida a nivel de la escala estructural se debe entonces a una interacción compleja entre mecanismos simples.

El problema planteado, relacionado con el modelado constitutivo de materiales heterogéneos mediante el uso de técnicas multiescalas, reviste una importancia científica e ingenieril indudable. Considere que con la tecnología y equipamiento actual, es posible adquirir un conocimiento muy detallado de la topología microestructural que posee un material heterogéneo, como así también la caracterización de cada componente, gracias a técnicas avanzadas de laboratorio. Así, surge casi en forma natural la

idea de incorporar esta valiosa información al momento de plantear nuevas formulaciones constitutivas. Lamentablemente, estas potencialidades que brindan los modelos multiescalas requieren aún mucho desarrollo, tanto desde el punto de vista teórico como numérico para que resulten abordables en la actualidad, sobre todo si se pretenden caracterizar fenómenos tan complejos como la falla material. Este hecho ha motivado el estudio presente y se entiende que los desarrollos presentados en esta tesis contribuyen a un entendimiento más acabado de la problemática planteada.

Asimismo, debido a la carencia actual de formulaciones mecánicas rigurosamente fundamentadas para el modelado de falla vía esquemas multiescalas, una de las motivaciones fundamentales de este trabajo ha sido proponer aportes en ese aspecto neurálgico del problema y hacia ese punto se han direccionado nuestros mayores esfuerzos.

1.2. Estrategias multiescala para modelar materiales heterogéneos

Durante las últimas décadas, se ha propuesto una gran diversidad de estrategias multiescala direccionadas a analizar, mediante el desarrollo de nuevos modelos matemáticos, el comportamiento mecánico constitutivo de materiales heterogéneos. Cada una de estas técnicas se han formulado a partir de diferentes enfoques teóricos.

En esta tesis y en concordancia con el trabajo de Böhm (2013), se distinguen tres estrategias generales, tal como se detallan en la Tabla 1.1 y que sucintamente se describen a continuación:

- (i) Los enfoques basados en *Aproximaciones de Campo Medio* adoptan como hipótesis la aproximación de microcampos (típicamente tensiones y deformaciones) uniformes a trozos, constantes en el seno de cada microconstituyente del material compuesto. Para cada componente se aproxima el campo por su valor medio. De allí el nombre de esta aproximación (este tipo de técnica se ha desarrollado a partir de los aportes fundamentales de Eshelby; ver referencias de este trabajo y otros en la Tabla 1.1).
- (ii) Los métodos de *acotación variacional* utilizan principios variacionales para determinar cotas rigurosas, superiores e inferiores, en las propiedades elásticas colectivas del compuesto (la palabra “colectiva” se utiliza en el sentido de considerar la interacción entre todos los componentes). Los ejemplos más conocidos son las cotas dadas por el límite superior de Voigt e inferior de Reuss que, para el caso del módulo de elasticidad de un compuesto con n componentes, están dados por:

$$\underbrace{\left(\sum_i^n (f_{v_i} E_i)^{-1} \right)^{-1}}_{\text{cota inferior (Reuss)}} \leq E \leq \underbrace{\sum_i^n f_{v_i} E_i}_{\text{cota superior (Voigt)}} \quad (1.1)$$

donde E es el módulo colectivo del compuesto, f_{v_i} y E_i son la fracción volumétrica (porosidad) y el módulo de Young del componente i , respectivamente. Ambos límites se pueden derivar simplemente de considerar distribuciones tipo serie o paralelo de cada componente (tensiones constantes o deformaciones constantes, respectivamente). Hill extendió estos límites para los tensores constitutivos tangentes (reemplazando E por el módulo tangente-tensorial). Son límites muy simples de evaluar y tienen validez universal. Pero por otro lado, en general brindan cotas muy desajustadas. Se han propuesto límites más ajustados por Hashin y Shtrikman (1963) y otros autores (ver referencias en la Tabla 1.1). Este tipo de aproximación al problema tiene un desarrollo intenso en la actualidad.

- (iii) Los métodos basados en el concepto del *Elemento de Volumen Representativo* (RVE por las siglas en inglés: Representative Volume Element). En este tipo de aproximación, la estrategia de homogeneización utiliza un elemento de volumen que intenta copiar la microestructura del material. Esta muestra de material está sujeta a diferentes estados de excitación mecánicos y, en base a su

respuesta, se intenta construir una descripción del comportamiento tensión-deformación en la macroescala. En general, este tipo de aproximación considera que el elemento de volumen debe ser suficientemente grande como para capturar una respuesta representativa de la heterogeneidad del material. Por otro lado, debe ser de tamaño limitado en dimensiones si es comparado con la longitud característica de la macroestructura. Estas consideraciones se satisfacen en la medida que haya una separación de escalas marcada entre los fenómenos que se describen en la macroescala, con respecto a los fenómenos microscópicos gobernados por la heterogeneidad del material. No obstante, como se verá en la próxima Subsección, hay casos específicos de este tipo de aproximación que no requieren una separación de escala notable. En la Tabla 1.1 pueden observarse referencias a trabajos basados en estas ideas.

Estrategias de análisis multiescala	Trabajos/autores que adoptan la aproximación
(i) Enfoques basados en aproximaciones de campo medio	Eshelby (1957); Hashin (1962); Mori y Tanaka (1973), Modelos autoconsistentes: Hill (1965); Christensen y Lou (1979).
(ii) Modelos de acotación variacional	Hashin y Shtrikman (1963); Willis (1981); Hashin (1983).
(iii) Modelos basados en la noción del RVE:	
(iii.a) Jerárquicos	Caso paradigmático: modelo de Gurson, Gurson (1977); Tvergaard (1981); Giusti et al. (2009).
(iii.b) Semiconcurrentes	Caso paradigmático: técnica FE ² , Feyel y Chaboche (2000).
(iii.c) Concurrentes	Lloberas-Valls (2013); Guidault et al. (2007).

Tabla 1.1: Taxonomía de modelos multiescala para analizar materiales heterogéneos.

En general, los dos primeros casos (i) y (ii) están restringidos al análisis de materiales heterogéneos que presentan microestructuras de topología simple y/o muy específicas. Motivo por el cual se han desarrollado una gran cantidad de soluciones analíticas. Mientras que el último tipo de aproximación (iii) es utilizado para introducir una descripción más detallada de microestructuras complejas y, por ende, su aplicación en la gran mayoría de los casos ha estado sujeta a soluciones computacionales u homogeneización del tipo computacional.

El interés de este trabajo se centra en una aproximación del tipo (iii) (más específicamente en las del tipo semiconcurrentes (iii-b) véase la Tabla 1.1). Además considera el acoplamiento entre dos escalas de longitud diferentes: (i) la macroescala (o estructural) y (ii) la microescala. Por ello, en la subsección siguiente, se efectúa un análisis más detallado de las características remarcables que identifican esta aproximación.

Resulta adecuado aquí introducir una aclaración importante en cuanto a la terminología que se utilizará en todo el documento presente. Las palabras “macro” y “micro” se utilizan para hacer referencia a cualquier objeto perteneciente a la macroescala o microescala respectivamente (campo, magnitud, dominio, frontera, etc.). Estos descriptores se colocarán indistintamente anterior o posterior al objeto a caracterizar, como por ejemplo: macroestructura, microestructura, deformación macro, deformación micro, etc. Además, el término micro deberá entenderse en un sentido generalizado, no necesariamente

relacionado al “orden real de longitud/tamaño micro” comúnmente utilizado en mecánica. En esta tesis, el descriptor “micro” deberá interpretarse siempre asociado a la escala en donde se pretende modelar y caracterizar la heterogeneidad material. Así, en materiales de tipo cementicios por ejemplo, la llamada “mesoestructura” haría las veces de nuestra denominada escala micro.

1.3. Modelos multiescala basados en el concepto de RVE

Inicialmente, se discute brevemente el concepto de RVE. Posteriormente, y en esta misma subsección, se describe una posible clasificación de los diversos métodos de esta tipología que han sido descritos en la literatura. La clasificación está basada en el nivel de acoplamiento que introduce cada modelo entre la macroescala y la microescala (ó RVE).

1.3.1. El concepto de RVE

Siguiendo la tendencia actual en la comunidad científica, se define al RVE como el tamaño mínimo de la muestra microestructural del material en estudio, a partir del cual (con tamaños mayores) la respuesta homogeneizada macroscópica que se extrae permanece casi inalterable. Definiciones alternativas al concepto de RVE pueden encontrarse en la literatura ([Böhm, 2013](#); [Termizer, 2012](#); [Qu y Cherkaoui, 2006](#)).

Un aspecto fundamental a tener en cuenta en el diseño adecuado del RVE, es la reconstrucción (distribución de fases y topología de la microestructura) del material heterogéneo. Para ello, se utilizan procedimientos que en general requieren desarrollos matemáticos complejos, e involucran dos tipos de problemas diferentes a resolver (ver [Böhm, 2013](#)): (i) reconstrucción estadísticamente equivalente de fases o componentes (por ejemplo en los casos de compuestos con un número considerable de fibras de refuerzo), o bien (ii) pretender diseñar la microgeometría, tan aproximada como sea posible, mediante el uso de microfotografías y tratamiento de imágenes posterior.

Asociado con este problema, está la cuestión (también fundamental) de decidir cuán grande debe ser la microcelda para que verifique las condiciones de ser estadísticamente homogénea (y así poseer el atributo de ser un RVE). Como se verá a través de los estudios presentados en esta tesis, el tamaño mínimo que caracteriza un RVE no es una propiedad microestructural exclusivamente, sino que depende además del modelo de homogenización adoptado.

Sin desconocer la importancia que involucra el tema relacionado con el diseño de RVE's que copien fielmente la microestructura del material heterogéneo, en esta tesis no se estudia este aspecto del problema. El enfoque dado se direcciona más al planteamiento de una técnica de salto de escala racionalmente formulada desde un punto de vista físico/mecánico, basándonos en conceptos cinemáticos y variacionales.

1.3.2. La cuestión de la existencia de un RVE

Para microestructuras cuyo comportamiento constitutivo homogeneizado muestra una respuesta estable, la existencia de un RVE de tamaño físicamente admisible es un concepto ampliamente aceptado. Se han realizado numerosos estudios para entender mejor esta cuestión (ver [Pindera et al., 2009](#); [Nemat-Nasser y Hori, 1999](#)) y actualmente se puede considerar que es un aspecto bien entendido del problema de diseño del RVE.

Sin embargo, para microestructuras heterogéneas constituidas por materiales que muestran ablandamiento y que por lo tanto son susceptibles de describir fenómenos de falla, la existencia de un RVE ha sido materia de discusión (ver [Gitman et al., 2007](#); [Geers et al., 2010](#)). Contribuciones recientes han demostrado que utilizando las técnicas clásicas de homogeneización, y luego de superar un estado mecánico crítico, no es posible encontrar un tamaño admisible microestructural que brinde soluciones físicamente coherentes, es decir se pierde la noción elemental de existencia del RVE ([Gitman et al., 2007](#); [Nguyen et al., 2010](#)).

Desde este punto de vista, es necesario cambiar el paradigma convencional de transferencia de información entre las escalas del problema multiescala basado en la definición de RVE para poder tratar materiales con ablandamiento (Belytschko et al., 2008; Nguyen et al., 2010; Verhoosel et al., 2010; Matous et al., 2008; Geers et al., 2010). Este hecho, que es clave y fundamental para capturar falla en materiales heterogéneos mediante técnicas multiescalas semi-concurrentes, es estudiado y descrito con detalle en esta tesis.

1.3.3. Taxonomía de modelos basados en RVE

Existen diversas aproximaciones que hacen uso del concepto de RVE. Éstas pueden clasificarse de diferentes maneras, según sea: la generalidad para modelar microestructuras complejas, el costo computacional requerido, el número de suposiciones introducidas por el modelo, el nivel de exactitud esperable respecto a respuestas obtenidas mediante Simulación Numérica Directa (DNS, *Direct Numerical Simulation*¹), etc.

En este apartado, y siguiendo (Belytschko et al., 2008), se las clasifica de acuerdo al criterio del grado de acoplamiento involucrado entre escalas y la forma en que la información se transfiere de una escala (RVE) a la otra (macroescala).

De acuerdo con este criterio, se pueden distinguir tres grandes clases de metodologías, como se explica a seguir. Los tres métodos utilizan el concepto de escala macro y micro, donde la microescala se modela a través del RVE. La diferencia entre cada uno de ellos es el tratamiento dado a la transferencia de información entre ambas escalas.

En la Fig. 1.1 se esquematizan gráficamente los tres casos que se consideran en esta clasificación y que se discuten a continuación.

- a) **Modelos jerárquicos.** En este caso, el RVE es utilizado para evaluar la respuesta mecánica asociada a un rango de parámetros predeterminados. Típicamente, los parámetros predefinidos pueden ser caminos de deformaciones macroscópicas impuestas y la respuesta mecánica pueden ser tensiones homogeneizadas. Con este conjunto de respuestas se construye una base de datos que se puede manejar de diversas formas. Por ejemplo, se puede construir un modelo cuasi-fenomenológico en la macroescala (normalmente denotados como de base micromecánica) a partir de esta base de datos de información precalculada. Alternativamente, se puede construir una grilla en el espacio paramétrico de deformaciones y asignar un estado de tensión homogeneizado a cada nodo de la grilla. Luego, mediante interpolación, es posible describir el comportamiento constitutivo macroscópico (tensión homogeneizada) para deformaciones arbitrarias.

Este tipo de aproximación ha ganado cierta popularidad porque es computacionalmente muy eficiente. Como desventaja se podría mencionar el hecho que los datos de entrada deben estar necesariamente parametrizados y deben ser de baja dimensionalidad. Por ende, es una técnica poco adecuada para modelar materiales con microestructuras altamente complejas.

El modelo paradigmático de este tipo de aproximación es el de (Gurson (1977)) para simular fractura dúctil. Este modelo macroscópico se desarrolla a partir de una serie de análisis límite efectuados a microceldas constituidas por una matriz, que responde a una relación constitutiva elastoplástica tipo J_2 , con un poro circular cuya dimensión se adapta para simular diferentes fracciones en volumen de vacíos.

- b) **Modelos semiconcurrentes.** El RVE se utiliza para resolver detalladamente la escala micro, bajo condiciones de borde que resultan consistentes con las deformaciones obtenidas en la escala

¹Se entiende por técnica DNS una aproximación numérica, típicamente basada en el método de elementos finitos, que incluye explícitamente en el modelo macro todas las heterogeneidades propias de la microestructura material. Representa una metodología extremadamente precisa dado que se obtiene la respuesta más confiable posible del material en estudio, pero, a su vez, es extremadamente costosa y por ende prohibitiva en la gran mayoría de las aplicaciones. Representa además la metodología por excelencia para utilizar como solución de referencia frente a formulaciones de tipo multiescala.

macroscópica. Luego, mediante alguna suposición típicamente energética, tal como el Principio de Hill-Mandel, se homogeneizan las tensiones que son transferidas a la escala macro. La compatibilidad cinemática (entre las escalas involucradas) y balance de fuerzas se verifican sólo aproximadamente, en el sentido de medidas promediadas. Su aplicación numérica en el contexto del método de elementos finitos se la conoce como técnica FE² (a partir de Feyel y Chaboche, 2000). Aplicaciones a fractura de materiales han sido propuestas en Belytschko et al. (2008); Song y Belytschko (2009); Nguyen et al. (2010, 2011); Matous et al. (2008); Coenen et al. (2012a), entre otros. Precisamente, la contribución de esta tesis puede considerarse como una técnica alternativa a las mencionadas en la oración previa, aunque con diferencias conceptuales muy importantes. Las ventajas y desventajas de este tipo de aproximaciones pueden considerarse como intermedias entre las presentadas por las otras dos categorías de modelos: jerárquicos y concurrentes.

- c) **Modelos concurrentes.** En esta aproximación, el RVE se introduce (o embebe) en la geometría del modelo macroscópico. Luego, utilizando técnicas basadas en multiplicadores de Lagrange, se impone la consistencia cinemática y el balance de la cantidad de movimiento entre ambas escalas, macro y micro, en un modo idéntico a las metodologías de descomposición de dominios.

Esta técnica se utiliza ampliamente y resulta muy apropiada cuando se adoptan aproximaciones diferentes en ambas escalas por ejemplo dinámica molecular en la microescala y modelos de continuo en la escala macroscópica. Cuando se utilizan elementos finitos para modelar numéricamente ambas escalas, la malla del RVE (refinada y que se embebe en la malla del macromodelo) no es necesariamente compatible con la malla del macromodelo.

La ventaja de este modelo es la elevada interacción entre las escalas, mientras que la principal desventaja radica en el hecho que sólo es computacionalmente viable en problemas donde la separación de escalas no es tan marcada ($\ell \approx \ell_{\text{RVE}}$), ver Fig. 1.1. Ejemplos de aplicación de esta metodología a fractura de materiales pueden encontrarse en la tesis de Lloberas-Valls (2013).

En la presente monografía se adoptó como estrategia global de análisis multiescala aquella descrita en el punto b). En particular, se supone que la respuesta constitutiva de la macroescala se obtiene mediante dos pasos secuenciales: (i) inserción de la macro-deformación en el RVE, y (ii) un procedimiento variacionalmente consistente de homogeneización (promedio volumétrico). Ambos pasos introducen en el modelo, interacciones no triviales entre ambas escalas. Adicionalmente, y a fin de dar consistencia mecánica a la formulación, se introducen restricciones cinemáticas específicas así como un principio de equivalencia energética. A partir de ello puede establecerse una transferencia adecuada de información durante el proceso de salto de escala.

1.4. Modelos monoescala para analizar falla de materiales

El análisis, estudio y evaluación de problemas de fractura en materiales ha sido históricamente abordado por la denominada Mecánica de Fractura. La subdisciplina más conocida de esta rama es la mecánica de fractura lineal elástica, con casi un siglo de desarrollo.

La generalización de esta teoría para incluir el comportamiento no-lineal material no ha sido trivial, ni los modelos desarrollados en la actualidad son completamente convincentes. Hoy en día, existen serias limitaciones para predecir el comportamiento estructural ante el fenómeno de fractura mediante este tipo de aproximación. Esto vale para una inmensa cantidad de problemas de elevado interés tecnológico. En particular, un gran abanico de casos de fractura dúctil son inabordables con técnicas derivadas de la mecánica de fractura no-lineal clásica.

Procedimientos basados en la noción de tasa de liberación de energía, de acuerdo a Griffith (Anderson, 1995), han sido precursores en el desarrollo de la mecánica de fractura. El concepto de energía de fractura surge de este tipo de abordaje y ha estado ligado a esta teoría desde sus inicios.

1.4.1. Modelos cohesivos

A partir del concepto de energía de fractura y basado en ideas originalmente propuestas por [Dugdale \(1960\)](#); [Barenblatt \(1962\)](#); [Hillerborg et al. \(1976\)](#); [Planas y Elices \(1992\)](#); [Elices et al. \(2002\)](#), se han desarrollado modelos mecánicos cohesivos muy simples y extremadamente efectivos. Éstos resultan muy apropiados para predecir fractura en el rango de los materiales cuasi-frágiles, aunque posteriormente se los ha generalizado para predecir falla dúctil ([Tvergaard y Hutchinson, 1992](#)).

El modelo consiste en introducir una interfaz (que admite discontinuidades en desplazamientos) en un cuerpo continuo (Ω), representando la existencia de una fisura. Sobre ambas superficies que delimitan la interfaz actúa un sistema de fuerzas cohesivas T que se oponen a la apertura β , como se muestra en la Fig. 1.2. Las fuerzas cohesivas se degradan con la separación de las superficies hasta perder completamente la cohesión, siguiendo una relación que debe ser definida. Se interpreta que la ecuación T vs. β es una relación constitutiva adicional a la relación constitutiva del continuo, que debe ser claramente establecida.

De este modo, el modelo de fuerzas cohesivas está asociado a una energía, G_F , por unidad de área de la interfaz. Si el comportamiento volumétrico del material no es disipativo, esta energía es la requerida al sistema de cargas externas para generar la separación de las superficies de la interfaz hasta la degradación completa de las fuerzas cohesivas. Ajustando los parámetros de la ley cohesiva adecuadamente, la energía G_F coincide con el concepto clásico de energía de fractura.

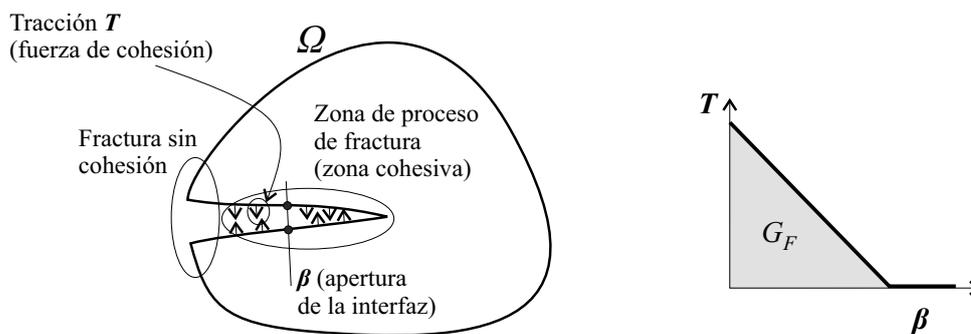


Figura 1.2: Esquema conceptual de modelo cohesivo para representar fractura.

Cuando el proceso de disipación del material, debido a la propagación de la fractura, se encuentra confinado en un volumen pequeño cerca de la punta de la fisura (zona de proceso de fractura), el modelo cohesivo idealizado monoescala es capaz de reproducir con bastante fidelidad los complejos mecanismos de degradación que se ponen en juego al nivel microscópico.

El aspecto clave en esta aproximación es la definición de la ley T vs. β . Si bien se ha extendido la utilización de leyes monoescala simples, puramente fenomenológicas, en esta tesis se propone la obtención de esta ley a través de un análisis multiescala, dado que en general la misma resulta altamente dependiente de la microestructura material.

1.4.2. Modelos basados en la mecánica del continuo

En forma alternativa a los modelos cohesivos para analizar procesos de fractura, se ha generalizado el uso de modelos de daño continuo, o en general, de modelos de materiales susceptibles de presentar ablandamiento.

El efecto de ablandamiento está íntimamente relacionado al concepto de pérdida de estabilidad del comportamiento constitutivo. Adicionalmente, en materiales invíscidos, surge también el fenómeno de bifurcación. Estos fenómenos (bifurcación y pérdida de estabilidad) son los que dan lugar a soluciones con localización de deformaciones y falla del material. Si se mantiene el formato estándar de los modelos constitutivos clásicos, el problema matemático asociado resulta mal colocado.

Una alternativa para mitigar este efecto es introducir algún tipo de regularización en la descripción constitutiva del modelo de ablandamiento, tales como: (i) *modelos no-locales* (Bažant et al., 1984; Bažant y Pijaudier-Cabot, 1988; Tvergaard y Needleman, 1995; Pijaudier-Cabot y Bažant, 1987; Bažant y Lin, 1988), (ii) *esquemas de gradientes de alto orden* (Aifantis, 1984b;a; Lasry y Belytschko, 1988; de Borst y Mühlhaus, 1992; de Borst et al., 1995; Peerlings et al., 1996, 2001, 2002), (iii) *modelos viscosos* (Needleman, 1988; Loret y Prévost, 1990; Sluys et al., 1993), (iv) *teoría de Cosserat del continuo micropolar* (Continuum Micro-Polar Cosserat's Theory) (Mühlhaus y Vardoulakis, 1987; Steinmann y Willam, 1991; de Borst, 1991, 1993; Etse y Nieto, 1998), entre otros. Estos esquemas de regularización aseguran que el fenómeno de localización de deformaciones tendrá lugar en un escenario termodinámicamente admisible, mostrando soluciones con bandas de localización estrechas cuyo espesor está físicamente bien definido y, por lo tanto, la disipación de energía que provee el modelo es objetiva.

1.4.3. Aproximación por Discontinuidades Fuertes del Continuo (ADFC)

Otra metodología que vale la pena mencionar aquí es la denominada Aproximación por Discontinuidades Fuertes del Continuo (ADFC), propuesta por X. Oliver y su grupo de colaboradores (Oliver, 2000; Oliver et al., 2002; Oliver y Huespe, 2004a;b). Esta técnica permite establecer un nexo entre: (i) los modelos basados en la mecánica del continuo (Sec. 1.4.2) y (ii) los modelos cohesivos (Sec. 1.4.1). Mediante la incorporación de unos pocos ingredientes conceptuales, la ADFC hace viable el planteamiento del problema de fractura material en un único marco teórico unificado tal que, partiendo de la descripción estándar (continua) se llega consistentemente a modelar mecanismos de degradación y falla que evolucionan hasta nuclear una fisura cohesiva.

Una característica peculiar de esta estrategia es que postula un único comportamiento constitutivo, el del material no fisurado. Esta ley constitutiva de continuo (tensión-deformación) regularizada adecuadamente y sujeta a una cinemática que incorpora discontinuidades en desplazamientos, degenera naturalmente en una ley cohesiva (tracción-salto) sobre la fisura (Oliver, 2000). De esta forma se evita tener que seleccionar una ley cohesiva independiente del comportamiento volumétrico, para controlar la apertura de la discontinuidad.

Si bien la metodología multiescala propuesta en esta tesis parte de fundamentos mecánicos muy diferentes respecto al modelo ADFC, comparte con éste uno de sus atributos distintivos. Como se demostrará en su momento, la ley cohesiva homogeneizada en nuestra formulación multiescala deriva del comportamiento constitutivo del continuo (material no fisurado) (ver Sec. 4.5).

1.5. Estado del arte en referencia al modelado multiescala de falla material utilizando un RVE

1.5.1. Modelos Clásicos o Multiescala Estándar

En la literatura disponible se han propuesto un gran número de contribuciones que describen aproximaciones multiescala basadas en el concepto de RVE. En general, sólo consideran el régimen mecánico en donde los materiales no están sujetos a localización de deformaciones.

Para colocar la presente monografía en el contexto adecuado, se menciona las contribuciones de De Souza Neto y Feijóo (2006, 2008, 2011); Perić et al. (2011) como los trabajos más significativos que describen los fundamentos mecánicos del modelo, desde una visión puramente variacional.

Los aportes mencionados en el párrafo previo conforman el andamiaje teórico sobre el que se sustenta la metodología desarrollada en esta tesis. Este formato teórico riguroso requiere ser reinterpretado, generalizado y reformulado para incluir en el modelado el proceso de falla material.

Otros trabajos representativos de esta línea, y sólo por mencionar algunos, han sido las contribuciones de Miehe et al. (2002); Miehe y Koch (2002); Miehe et al. (1999).

A lo largo del presente documento se denomina a este tipo de aproximación como “*Modelo Multiescala Clásico*” (MMCI). En la actualidad puede considerarse que esta familia de metodologías está bien establecida desde el punto de vista mecánico, físico y matemático. El mayor esfuerzo en esta línea de trabajo se está volcando a desarrollar esquemas computacionales viables y robustos, como también a desarrollar aplicaciones concretas. Un ejemplo típico de este tipo de aplicaciones, en un problema de gran interés tecnológico, se da en el modelado de materiales policristalinos durante el régimen que no se induce falla a nivel macroscópico.

1.5.2. Modelos que tratan el régimen mecánico en donde los materiales muestran comportamiento inestable

La decisión de incorporar ablandamiento para modelar falla de materiales a nivel micromecánico (como mecanismo para inducir la degradación a nivel macro) introduce nuevos desafíos teóricos que requieren un análisis cuidadoso. Los modelos multiescala clásicos, tales como los mencionados en la subsección precedente, no se pueden aplicar directamente a microestructuras con materiales inestables. Esto se debe principalmente a las dos razones siguientes:

- Se vuelve imperativo utilizar una teoría constitutiva regularizada a nivel micromecánico para garantizar la correcta colocación matemática del problema.
- Un aspecto clave asociado al proceso de localización de deformaciones es el llamado *efecto tamaño*. Este efecto es muy conocido en el contexto de la mecánica de fractura y falla fenomenológica de materiales. Es más, ha sido extensamente estudiado en la bibliografía, principalmente por [Bažant y Planas \(1998\)](#). Como resultado de este fenómeno, la respuesta homogeneizada de tensiones (en el sentido clásico de promediado en el volumen representativo) durante el régimen poscrítico se vuelve extremadamente sensible al tamaño de la microcelda. Se obtiene así una respuesta homogeneizada cada vez más frágil en la medida que se incrementa el tamaño del RVE.

Evidentemente, la situación descrita en el segundo ítem revela indicios muy fuertes sobre la imposibilidad de sostener el concepto de RVE [\(Gitman et al., 2007\)](#), al menos en el sentido estándar dado a la microcelda y al proceso de homogeneización. Se remarca que la existencia del RVE es un pilar fundamental en este tipo de aproximación. En el Cap. 7 se proponen varios ejemplos numéricos para mostrar este grave problema teórico, aquí denominado pérdida de objetividad. Hoy en día, la comunidad científica parece haber consensuado la necesidad de contar con nuevas formulaciones multiescala basadas en técnicas de homogeneización más elaboradas (no estándar), que intenten dar soluciones a esta importante falencia.

En este sentido se cita, por ejemplo, un trabajo reciente de [Belytschko et al. \(2008\)](#) que describe un procedimiento de homogeneización específico. El promediado volumétrico de tensiones en el RVE excluye las zonas con localización de deformaciones, generando así una respuesta estable. Una característica adicional del procedimiento sugerido por estos autores en una contribución más reciente [\(Song y Belytschko, 2009\)](#), es que se proponen microceldas de tamaño predeterminado, según el tamaño del elemento finito de la macroescala. Obviamente este hecho revela una limitación de la metodología propuesta, ya que se solapan conceptos propios de la formulación mecánica del modelo con aspectos de la aproximación numérica utilizada.

Otra técnica interesante para modelar falla en interfaces adhesivas predefinidas, se debe a [Matous et al. \(2008\)](#); [Kulkarni et al. \(2009\)](#). Ellos postulan un modelo multiescala basado en la existencia de un RVE vinculado a una interfaz adhesiva macroscópica. El vector salto de desplazamiento entre las caras de la interfaz macro es luego prescrito como condición de borde en la microcelda. Una limitación de este enfoque está relacionada con el hecho que la altura del RVE debe ser igual al espesor físico de la interfaz adhesiva. Otra limitación es que el modelo no puede extenderse trivialmente a problemas donde originalmente el dominio es continuo, sin defectos. Es decir, las superficies en las que surgen los modos discontinuos deben estar predefinidas en el dominio de análisis macro.

Verhoosel et al. (2010) han desarrollado un método para obtener una ley homogeneizada cohesiva macro a partir de microestructuras que presentan evolución de fisuras. Nguyen et al. (2010, 2011) han elaborado aún más esta idea e incluyen una teoría de gradientes en la microcelda con el fin de regularizar el comportamiento constitutivo del material con ablandamiento. En los dos últimos trabajos mencionados se introduce la noción de zona de falla promedio, que es un subdominio específico del RVE. Sólo en esa zona se realiza el promediado de tensiones durante la etapa poscrítica material. Utilizando ejemplos numéricos, los autores demuestran la existencia de respuestas macroscópicas que son objetivas con respecto al tamaño del RVE. Aunque esta metodología representa una técnica que parece tener fundamento físico, el procedimiento de homogeneización restringido al subdominio de falla se introduce en el modelo como una definición a-priori, sin la debida justificación mecánica. La cinemática en zona de falla micro no tiene una conexión directa con la cinemática observada al nivel macroscópico. Además, los resultados mostrados por los autores revelan una discontinuidad notable en la respuesta constitutiva macro cuando se analizan micro estructuras porosas, indicando una clara deficiencia en la formulación teórica del modelo.

A partir de este breve análisis del estado del arte en esta materia, se concluye que aún no existe una tendencia bien definida (y menos aún en lo que se refiere a un marco teórico unificado basado en cuestiones puramente físicas y mecánicas) para describir una aproximación al problema de falla en materiales heterogéneos utilizando técnicas multiescala y basados en la noción de RVE. Se considera que la formulación variacional desarrollada en esta tesis es capaz de abordar esta cuestión de manera consistente y satisfactoria, representando así un aporte ciertamente original en la temática.

1.6. Propuesta de una nueva formulación multiescala para la falla de materiales

En la presente contribución, se elabora una teoría mecánica racional basada en formular adecuadamente el mecanismo de transferencia de información cinemática desde la escala macro hacia la escala micro, introduciendo un nuevo concepto para la inserción de la deformación en el RVE.

Como premisa de la formulación multiescala propuesta para el tratamiento de falla material se asume en la macroescala un cuerpo *continuo*, donde (como se esquematiza en la Fig. 1.3), al producirse inestabilidad material, es posible la activación de fisuras cohesivas (Sec. 1.4.1). Se considera que los puntos del continuo están vinculados a microceldas que definen su estado mecánico constitutivo, de la misma forma que las fuerzas cohesivas de la fisura se obtienen a partir de la resolución mecánica de una microcelda. Las microceldas para un punto del continuo y un punto sobre la fisura tendrán características distintivas (variables mecánicas, transferencia de información, condiciones de borde) que permitirá obtener una respuesta homogeneizada físicamente congruente y consistente con el concepto de RVE (Sec. 1.3.1).

Como convención, la expresión *formulación multiescala* se utiliza para referirse a la metodología completa propuesta para el tratamiento de la evolución de deterioro del material, desde la etapa inicial de carga hasta el total agotamiento (proceso de falla). Se incluye en ella el desarrollo de las técnicas detección de inestabilidad y de transición entre los modelos. La expresión *modelo multiescala* se aplica a los procedimientos en que se divide la formulación propuesta y que trata cada uno de los estados mecánicos de la macroescala, principalmente en lo que se refiere a la definición de las características de la microescala para obtener un respuesta homogeneizada constitutiva en la macroescala. Se define, en este trabajo, un modelo para la etapa estable del material (continuo) y otro modelo para la etapa inestable (fisura cohesiva). Dentro de cada modelo se denomina *submodelo multiescala* a diferentes elecciones de las condiciones de borde aplicadas sobre la microcelda (se entrará en más detalle en los Caps. 3 y 4).

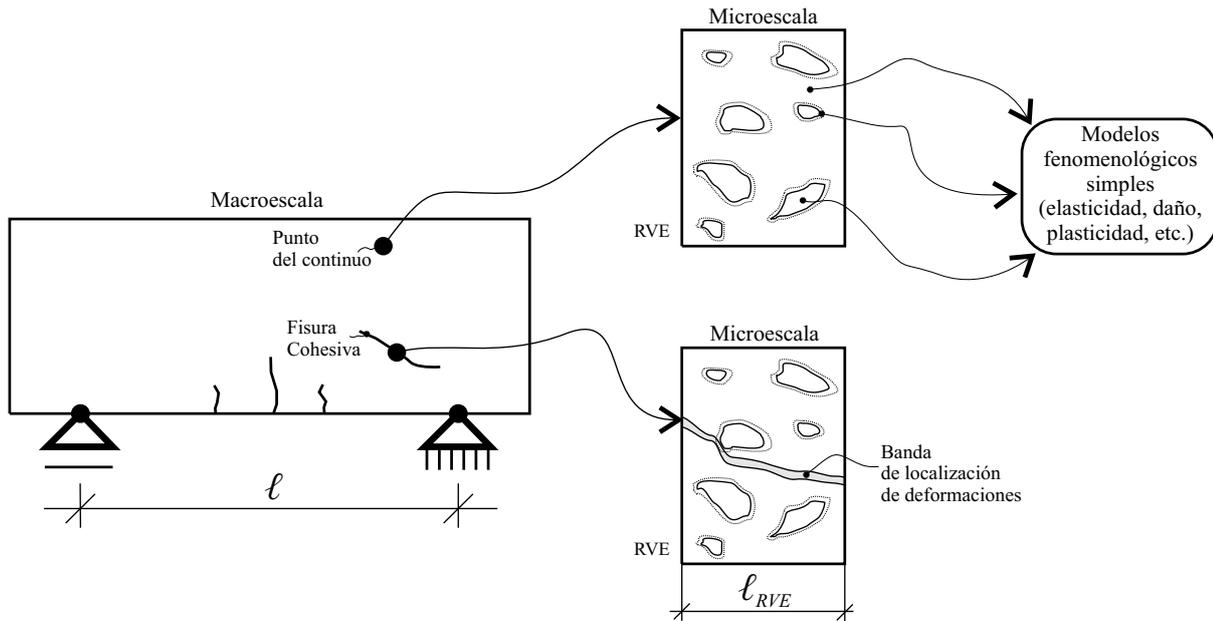


Figura 1.3: Esquema de mecánica asumido en la formulación propuesta para el tratamiento de falla material mediante multi-escala.

1.6.1. Estructura de la tesis

La presentación del trabajo se divide en cinco Partes, en la Parte I (presente) se realiza una introducción (*estado del arte*) al modelado de falla material, con hincapié en las metodologías multisescalas.

En la Parte II se desarrolla la teoría conceptual y matemática de la formulación multiscala propuesta. Dentro de ella, en el Cap. 2 se describe el modelo de fisura cohesiva adoptado en la macroescala. En los Caps. 3 y 4 se introduce los modelos multisescalas que definen el comportamiento mecánico de los puntos del continuo (etapa macro estable) y los puntos pertenecientes a la fisura cohesiva (etapa macro inestable), respectivamente.

En la Parte III se presenta la implementación numérica utilizada, considerando un problema de elementos finitos (FE^2), tanto de la macroescala (Cap. 5) como en la microescala (Cap. 6).

En la Parte IV se proponen varios ejemplos numéricos de validación de la formulación.

Finalmente, en la Parte V se presenta las conclusiones del trabajo.

Parte II

Formulación multiescala para el modelado de falla material

Capítulo 2

Modelo macro con nucleación de fisuras cohesivas

2.1. Generalidades

La idea que subyace en la exposición de este Capítulo es presentar las ecuaciones básicas del problema de equilibrio macro, el cual admite nucleación y propagación de fisuras cohesivas. Este tipo de problema es clásico en la actualidad, por ende la descripción mecánica por sí sola no representa un aporte relevante del trabajo. No obstante, la colocación formal del modelo macro representa el punto de partida para obtener una visión globalizadora de la estrategia multiescala propuesta. En este sentido, el presente capítulo describe específicamente:

- (i) en qué punto concreto del análisis macro se requiere el acoplamiento y/o interacción con la microestructura heterogénea, y
- (ii) para qué tipo de variables se propone realizar un salto de escala.

A partir de los desarrollos aquí elaborados se evidencia el concepto fundamental de esta contribución: *la técnica multiescala propuesta reemplaza la necesidad de adoptar modelos constitutivos de tipo fenomenológicos, logrando encapsular un comportamiento material altamente complejo a nivel micromecánico, utilizando para ello procedimientos de homogeneización o promediado de campos* (ver esquema idealizado en la Fig. 2.1).

La descripción en detalle de las técnicas propuestas para la homogeneización constitutiva se discute en los dos capítulos siguientes. Por ende, el modelo mecánico multiescala macro-micro completo, será íntegramente definido tras los desarrollos que se presentan en el Cap. 3 y Cap. 4.

2.2. Premisas básicas adoptadas para el modelo en la macroescala

A continuación se enumeran las suposiciones y definiciones básicas a partir de las cuales se fundamenta la descripción del problema mecánico en la macroescala, a saber:

- (i) El sólido en estudio se identifica con un cuerpo \mathcal{B} de puntos materiales. En la macroescala, un punto material genérico de \mathcal{B} se denota como “ \mathbf{x} ”¹.
- (ii) La descripción cinemática se plantea considerando hipótesis de pequeñas deformaciones. En consecuencia, es posible utilizar una única configuración para el cuerpo \mathcal{B} , denotada como Ω (*configuración de referencia*). Con Ω se representa una subregión (abierta y acotada) del espacio Euclídeo de puntos (\mathbb{R}^{ndim}), que tiene correspondencia biunívoca con \mathcal{B} (“ndim” es la dimensión geométrica del problema).

¹Con cierto abuso de notación, se utilizará la misma simbología “ \mathbf{x} ” para representar las *coordenadas* del punto material respecto a un sistema de referencia específico, definido en la macroescala (ver Fig. 2.1).

- (iii) Sólo se consideran problemas cuasiestáticos. Mediante la terminología “ t ” se simboliza una variable de *pseudo-tiempo*, que crece en forma monótona, donde $t \in [0, t_F]$ siendo $[0, t_F]$ el intervalo completo de análisis. Esta variable se utiliza para posicionar secuencialmente la evolución del problema no lineal material. No representa una medida de tiempo físico, sino simplemente un parámetro de control incremental.

Por razones que quedarán en evidencia más adelante, resulta conveniente escribir ciertas ecuaciones del modelo en forma incremental. Para ello se utiliza el operador $d(\bullet)$, indicando un incremento infinitesimal de su argumento (\bullet).

- (iv) El cuerpo \mathcal{B} está sometido a un *sistema de fuerzas* cuasiestático predefinido: fuerzas por unidad de volumen $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ y tracciones $\mathbf{T}_N(\mathbf{x}, t)$ en la superficie. La frontera del dominio Ω , supuesta suave por partes, se simboliza mediante Γ . Como es usual, Γ admite una subdivisión en dos subconjuntos, Γ_D y Γ_N (tal que $\Gamma_D \cup \Gamma_N = \Gamma$ y $\Gamma_D \cap \Gamma_N = \emptyset$), sobre los cuales se definen los desplazamientos prescritos, \mathbf{u}_D , y las tracciones impuestas, \mathbf{T}_N , respectivamente. Además, \mathbf{v} representa el vector unitario normal (saliente) a la frontera Γ , ver Fig. 2.1.
- (v) Inicialmente, el sólido en la macroescala se idealiza como un medio estadísticamente homogéneo y *continuo*, para el cual el estado mecánico de un punto genérico \mathbf{x} está caracterizado por el tensor de deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}$ y el tensor de tensiones $\boldsymbol{\sigma}$ (por ejemplo el punto \mathbf{x}_R en la Fig. 2.1). Sin embargo, debido a fenómenos de degradación que tienen lugar a nivel microestructural, resulta necesario considerar un escenario mecánico macro alternativo más general.

Esto es un aspecto crucial en la aproximación propuesta:

La evolución de procesos irreversibles de localización en la microescala puede inducir en la respuesta macroscópica una condición crítica de inestabilidad material. Esto implica una respuesta constitutiva macro con ablandamiento. Una hipótesis fundamental que se introduce en la presente formulación multiescala es que, a partir del mencionado punto de inestabilidad, la descripción mecánica macro se enriquece mediante la incorporación de una fisura cohesiva, \mathcal{S} , la cual llevará en cuenta la compleja fenomenología cinemática y constitutiva que se manifiesta a nivel micro (aunque sólo en forma homogeneizada). Desde un punto de vista físico, el modelo de fisura macro embebida representa, por ejemplo, la existencia de bandas de corte (en problemas de falla de metales), fracturas (en materiales cuasi-frágiles), superficies de deslizamiento (en problemas geológicos o geotécnicos), etc.

En la formulación mecánica, el concepto de fisura cohesiva introduce dos características adicionales que no pueden reproducirse mediante una descripción cinemática convencional. La primera de ellas es: (a) la incorporación de un nuevo campo cinemático independiente, $\boldsymbol{\beta}$, definido sobre la superficie \mathcal{S} (ver punto \mathbf{x}_S en la Fig. 2.1). La interpretación física de $\boldsymbol{\beta}$ es el vector de apertura de fisura o salto de desplazamientos a través de \mathcal{S} . Geométricamente, \mathcal{S} está caracterizada por su correspondiente vector normal unitario \mathbf{n} , el cual puede ser espacialmente variable. Este tipo de cinemática se la conoce bajo el nombre *Cinemática con Discontinuidades Fuertes*. La segunda característica mencionada es: (b) introducción de un esfuerzo interno generalizado adicional, el cual es conjugado termodinámicamente al salto $\boldsymbol{\beta}$. Esta variable dual se interpreta como la *Tracción Cohesiva*, \mathbf{T} , sobre la fisura \mathcal{S} .

En esta formulación, \mathbf{T} depende constitutivamente de $\boldsymbol{\beta}$ a través de una ley multiescala que considera la heterogeneidad del material y el proceso de falla microscópico.

- (vi) Resulta necesario postular un criterio para detectar inestabilidad material y poder así nuclear una fisura cohesiva. En este sentido se considera un análisis de bifurcación discontinua, basado en la singularidad del tensor localización homogeneizado. Este criterio brinda la siguiente información: (a) el instante de tiempo específico para la nucleación de la fisura cohesiva, al cual se indica como t_N , y (b) el vector normal a \mathcal{S} . Detalles específicos de esta metodología se discuten en la Sec. 2.5.

- (vii) Por simplicidad, se asume que las fisuras en la macroescala no alcanzan la frontera Dirichlet Γ_D (esto evita definir condiciones de borde sobre el campo β). También se considera que las fisuras no se cruzan entre sí.
- (viii) Cada punto $\mathbf{x} \in \Omega$, de la macroescala, está vinculado a un dominio microestructural heterogéneo, suficientemente representativo, que se denomina RVE y que matemáticamente se representa a través del dominio Ω_μ , ver Fig. 2.1. Se asume que existe un salto de escala, en el sentido que las longitudes características que intervienen en la descripción del modelo microestructural ℓ_{RVE} es mucho menor que aquella caracterizando la escala macro: ℓ . Observe que esta noción se aplica incluso a puntos que pertenecen a la fisura cohesiva macro \mathcal{S} . La mecánica a nivel macro no queda completamente definida hasta no conocer la mecánica a nivel micro, como se explica en este capítulo.

Precisamente la existencia del concepto de RVE ha sido tema de discusión actual en relación al modelado de falla material vía técnicas multiescala (ver Sec. 1.3.2). La filosofía de este trabajo es justamente: *para el modelado de falla material se torna imperativo proponer nuevas formulaciones multiescala alternativas, mecánicamente consistentes, que preserven la noción básica y fundamental de existencia del RVE*. Bajo este precepto deberá entenderse la contribución de esta tesis.

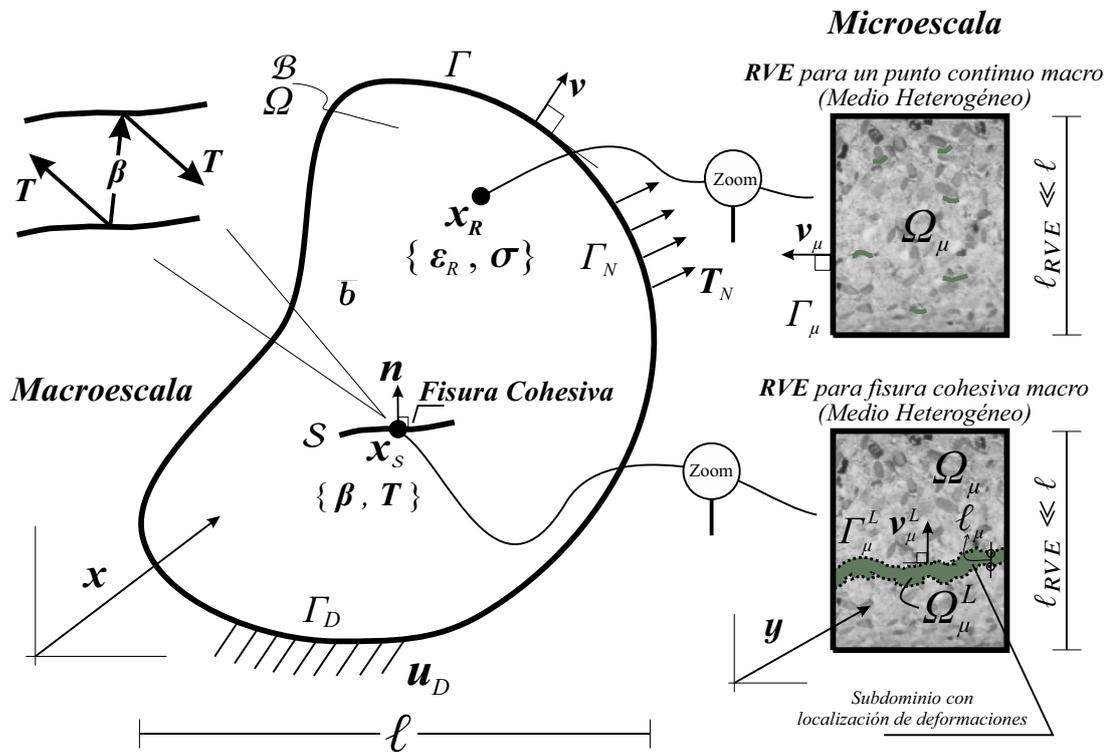


Figura 2.1: Esquema idealizado del modelo multiescala (macro-micro) para falla material, utilizando el concepto de RVE.

2.3. Cinemática con discontinuidades fuertes

Mientras el comportamiento constitutivo macro se mantiene estable, la descripción cinemática convencional (continua) resulta suficiente para describir la mecánica del medio en estudio. Por el contrario, cuando la respuesta constitutiva se torna inestable en algún punto $\mathbf{x} \in \Omega$ se introduce, en dicho punto, una fisura cohesiva \mathcal{S} . Se asume que es conocido el instante de activación de la fisura, t_N , y su orientación espacial en términos del vector normal, \mathbf{n} , a partir del criterio descrito en la Sec. 2.5. Una vez nucleada la fisura \mathcal{S} , su orientación permanece fija para todo $t > t_N$ (ver Fig. 2.2). Por simplicidad en la formulación

se asume una única fisura en el medio, aunque la generalización para considerar múltiples superficies de discontinuidad no ofrece complejidades conceptuales.

La incorporación de una fisura en un sólido inicialmente continuo exige una descripción cinemática particular, dado que el campo de desplazamiento, \mathbf{u} , se vuelve discontinuo sobre \mathcal{S} : $\llbracket \mathbf{u} \rrbracket_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, t) \neq 0$, $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{S}$ y $\forall t \in [t_N, t_F]$. En la expresión se ha utilizado el operador $\llbracket (\bullet) \rrbracket_{\mathcal{S}}$, para indicar una discontinuidad o salto en el campo (\bullet) sobre la superficie \mathcal{S} . Este operador puede definirse como:

$$\llbracket (\bullet) \rrbracket_{\mathcal{S}} = (\bullet)|_{(x+\xi \mathbf{n})} - (\bullet)|_{(x-\xi \mathbf{n})} \quad \forall \mathbf{x} \in \mathcal{S} \quad (2.1)$$

donde ξ es una perturbación escalar tal que $\xi \rightarrow 0$ y la operación $(\bullet)|_{\mathbf{x}}$ implica la evaluación del campo (\bullet) en el punto \mathbf{x} .

En esta Sección se introduce el formalismo matemático para describir esta cinemática con discontinuidades fuertes. Por simplicidad, de aquí en adelante se utilizara el símbolo β para denotar el salto o discontinuidad en desplazamientos:

$$\beta(\mathbf{x}, t) = \llbracket \mathbf{u} \rrbracket_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}, t) \quad (2.2)$$

Considere el cuerpo \mathcal{B} , en su configuración de referencia Ω , el cual exhibe una discontinuidad en el campo de desplazamientos a través de \mathcal{S} con normal \mathbf{n} . La superficie \mathcal{S} divide a Ω en dos subdominios, Ω_+ y Ω_- , cada uno de éstos se identifica de acuerdo al sentido de \mathbf{n} (\mathbf{n} apunta hacia Ω_+), ver Fig. 2.2. Se introduce a continuación un conjunto de definiciones geométricas que se utilizará en breve y que pueden apreciarse en la Fig. 2.2-b. Con el símbolo Ω^φ se hace referencia a un subdominio arbitrario de Ω ($\Omega^\varphi \subset \Omega$) que incluye la interfaz \mathcal{S} ($\mathcal{S} \subset \Omega^\varphi$). La superficie \mathcal{S} divide a Ω^φ en dos subdominios Ω_+^φ y Ω_-^φ , de acuerdo a la dirección de \mathbf{n} (\mathbf{n} apunta hacia Ω_+^φ). A su vez, Γ^φ es la frontera de Ω^φ , la cual puede subdividirse según: $\Gamma^\varphi = \mathcal{S}_+ \cup \mathcal{S}_- \cup \Gamma_I^\varphi \cup \Gamma_{II}^\varphi$. Considere además que para todo punto $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$ es posible definir un sistema cartesiano ortonormal local a la fisura, definido por los versores $\{\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}\}$.

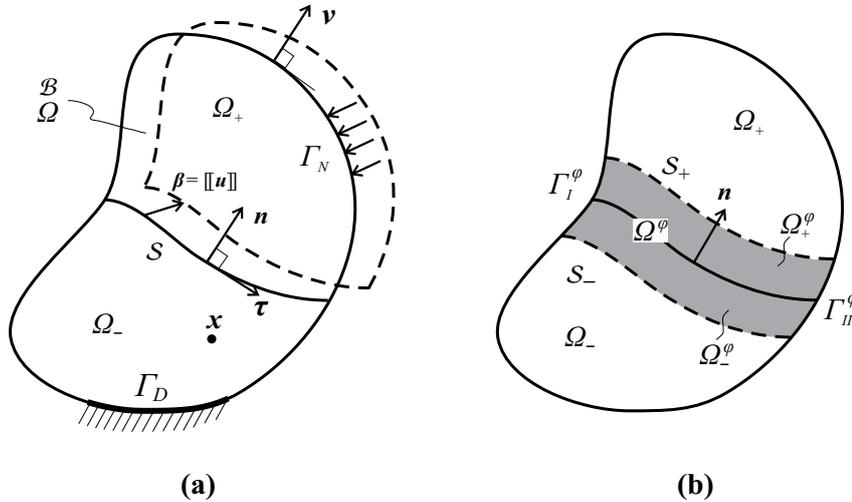


Figura 2.2: Ingredientes básicos y nomenclatura para describir una cinemática con discontinuidades fuertes sobre \mathcal{S} .

Según [Simo y Oliver \(1994\)](#), el campo de desplazamiento total $\mathbf{u}(\mathbf{x}, t)$, compatible con una cinemática con discontinuidades fuertes, puede escribirse como la suma de dos términos:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \overbrace{\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)}^{\text{continuo}} + \overbrace{\mathcal{M}_{\mathcal{S}}(\mathbf{x})\beta(\mathbf{x}, t)}^{\text{discontinuo}} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \quad (2.3)$$

donde $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}, t)$ y $\beta(\mathbf{x}, t)$ representan el campo de desplazamiento regular (continuo) y el salto en desplazamientos, respectivamente. Ambas funciones son suficientemente regulares sobre Ω y \mathcal{S} .

En la Ec. (2.3), $\mathcal{M}_{\mathcal{S}}(\mathbf{x})$ es una función preestablecida, constante en el tiempo, usualmente denominada *Función Salto Unitario*, que se define como (ver Fig. 2.3-b):

$$\mathcal{M}_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}) = \mathcal{H}_{\mathcal{S}}(\mathbf{x}) - \varphi(\mathbf{x}) \quad (2.4)$$

donde la función $\mathcal{H}_S(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ es la *Función escalón (Heaviside)*, colocada sobre la superficie de discontinuidad \mathcal{S} :

$$\mathcal{H}_S(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_- \\ 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_+ \end{cases} \quad (2.5)$$

y $\varphi(\mathbf{x}) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ es una función escalar continua y arbitraria, excepto por las dos condiciones siguientes:

$$\varphi(\mathbf{x}) = \begin{cases} 0 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_- \setminus \Omega^\varphi \\ 1 & \forall \mathbf{x} \in \Omega_+ \setminus \Omega^\varphi \end{cases} \quad (2.6)$$

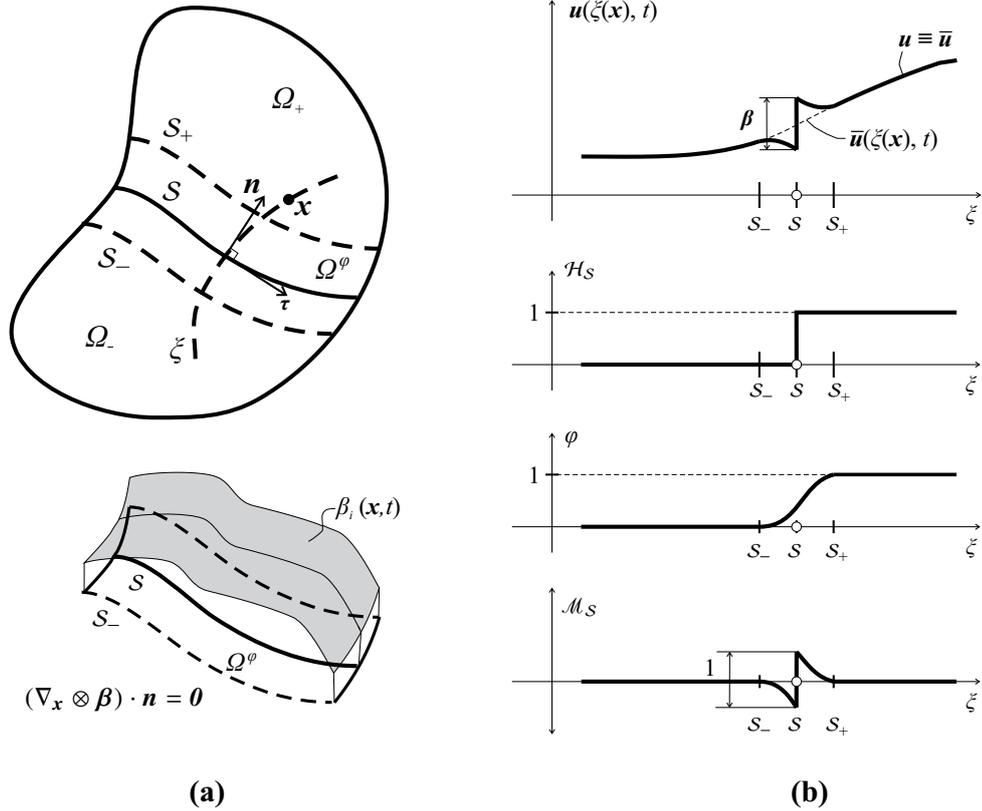


Figura 2.3: Cinemática con discontinuidades fuertes de soporte compacto.

En forma estricta, el campo cinemático adicional β tiene significado físico sólo sobre la interfaz cohesiva \mathcal{S} . No obstante, resulta de interés extender el soporte de definición de β a todo el subdominio Ω^φ , tal como se sugiere a continuación (ver también Fig. 2.3-a):

$$\beta : \Omega^\varphi \times [t_N, t_F] \rightarrow \mathbb{R}^{\text{ndim}} \quad \text{tal que} \quad (\nabla_{\mathbf{x}} \otimes \beta) \cdot \mathbf{n} = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^\varphi \quad (2.7)$$

donde $\nabla_{\mathbf{x}}$ es el operador gradiente en la macroescala, de allí el subíndice \mathbf{x} , y \otimes representa un producto tensorial. La Ec. (2.7) no debe interpretarse como una restricción sobre el campo β , sino más bien como una generalización que se introduce para dar significado matemático a términos que contengan gradientes de la variable β , como se verá a continuación.

Considerando el conjunto de expresiones previas (Ecs. (2.3), (2.4) y (2.7)) el tensor de deformaciones macro, ε , compatible con la Ec. (2.3) y para todo punto material que no pertenece a la fisura cohesiva, puede expresarse como:

$$\varepsilon(\mathbf{x}, t) = \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \mathbf{u}(\mathbf{x}, t) = \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \bar{\mathbf{u}} + \mathcal{M}_S \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \beta - \beta \otimes^s \nabla_{\mathbf{x}} \varphi = \varepsilon_R(\bar{\mathbf{u}}, \beta) \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S} \quad (2.8)$$

donde el subíndice “s” implica simetría en la operación. Observe que la expresión anterior contiene sólo términos regulares (acotados), por ello se incorpora la terminología *deformación regular* $\varepsilon_R(\bar{\mathbf{u}}, \beta) \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S}$.

Por otra parte, en los puntos ubicados sobre la fisura cohesiva \mathcal{S} (es decir $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{S}$) se introduce la noción de *deformación generalizada*; la cual, en este caso, viene caracterizada por: (i) el vector $\boldsymbol{\beta}$ actuante sobre la superficie de discontinuidad \mathcal{S} con normal \mathbf{n} y (ii) su contraparte regular subyacente, $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ (ver Ec. (2.8)). Se puede juntar ambas contribuciones y caracterizar la deformación macro asociada a la fisura cohesiva a través de la siguiente lista de objetos: $\{\boldsymbol{\varepsilon}_R, \boldsymbol{\beta}, \mathbf{n}\}$.

A este nivel de desarrollo se está en condiciones de introducir el concepto formal de admisibilidad cinemática en la macroescala. Se dice que el campo de desplazamiento total discontinuo \mathbf{u} , véase la Ec. (2.3), es cinemáticamente admisible si puede ser caracterizado por el par de elementos $(\bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\beta})$ del conjunto \mathcal{U} , el cual se define como:

$$\mathcal{U}(\Omega) \equiv \left\{ (\bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\beta}) \mid \bar{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega) \wedge \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{H}^1(\Omega^\varphi) \wedge \bar{\mathbf{u}}|_{\Gamma_D} = \mathbf{u}_D \right\} \quad (2.9)$$

donde $\mathbf{H}^1(\bullet)$ es el espacio vectorial de las funciones definidas en el dominio (\bullet) , cuya primer derivada es cuadrado integrable.

A partir de la expresión de la Ec. (2.9), es posible definir el espacio vectorial \mathcal{V} que caracteriza las variaciones virtuales cinemáticamente admisibles de desplazamientos discontinuos (aquí denotadas como $\hat{\mathbf{u}} = \hat{\bar{\mathbf{u}}} + \mathcal{M}_S \hat{\boldsymbol{\beta}}$). Dicho espacio \mathcal{V} se describe mediante:

$$\mathcal{V}(\Omega) \equiv \left\{ (\hat{\bar{\mathbf{u}}}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \mid \hat{\bar{\mathbf{u}}} \in \mathbf{H}^1(\Omega) \wedge \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbf{H}^1(\Omega^\varphi) \wedge \hat{\bar{\mathbf{u}}}|_{\Gamma_D} = \mathbf{0} \right\} \quad (2.10)$$

donde se utiliza la simbología $(\hat{\bullet})$ para indicar variaciones virtuales cinemáticamente admisibles de una variable genérica (\bullet) . Esta nomenclatura se respetará a lo largo de toda la tesis.

Las definiciones de las Ecs. (2.9) y (2.10) conforman la estructura matemática necesaria para describir el problema de equilibrio macro en un sentido variacional.

2.4. Problema de equilibrio variacional en la macroescala

El primer punto importante a considerar, es el concepto de potencia virtual interna para el modelo macro. En el contexto presente se debe evaluar dos situaciones diferentes:

- Para la parte continua del sólido (es decir $\forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S}$ y $\forall t \in [0, t_F]$) la potencia virtual interna, por unidad de volumen, se define como: $P_{\Omega}^{\text{int}} = \boldsymbol{\sigma} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R$;
- Para la fisura cohesiva (es decir $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{S}$ y $\forall t \in [t_N, t_F]$) la potencia virtual interna, por unidad de área (con normal \mathbf{n}), viene dada por: $P_S^{\text{int}} = \mathbf{T} \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}}$;

donde $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R = \boldsymbol{\varepsilon}_R(\hat{\bar{\mathbf{u}}}, \hat{\boldsymbol{\beta}})$ (ver Ec. (2.8)) y $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ representan, respectivamente, la deformación regular virtual admisible y el salto virtual admisible. A partir de lo planteado se observa la existencia de dos pares de variables duales que generan potencia virtual interna en forma independiente: $\{\boldsymbol{\sigma}, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R\}$ y $\{\mathbf{T}, \hat{\boldsymbol{\beta}}\}$.

La potencia virtual externa sigue la definición convencional y se compone también de dos contribuciones, a saber:

- Potencia virtual externa debida al sistema de fuerzas de cuerpo \mathbf{b} , por unidad de volumen: $P_{\Omega}^{\text{ext}} = \mathbf{b} \cdot \hat{\mathbf{u}}$;
- Potencia virtual externa debido al sistema de tracciones \mathbf{T}_N , por unidad de superficie: $P_{\Gamma_N}^{\text{ext}} = \mathbf{T}_N \cdot \hat{\bar{\mathbf{u}}}$.

Es posible ahora hacer uso del Principio de Potencias Virtuales (PPV) para encontrar la forma variacional del problema de equilibrio macro con posible nucleación de fisuras cohesivas, el cual se

enuncia como sigue:

Dadas las fuerzas $\mathbf{b}(\mathbf{x}, t)$ por unidad de volumen, $\forall \mathbf{x} \in \Omega$, y las tracciones superficiales $\mathbf{T}_N(\mathbf{x}, t)$, $\forall \mathbf{x} \in \Gamma_N$; encontrar los campos de desplazamientos cinemáticamente admisibles $(\bar{\mathbf{u}}, \beta) \in \mathcal{U}$, tal que:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega \setminus S} \boldsymbol{\sigma} : \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s (\hat{\mathbf{u}} + \mathcal{M}_S \hat{\beta}) d\Omega + \int_S \mathbf{T} \cdot \hat{\beta} dS - \\ & - \int_{\Omega \setminus S} \mathbf{b} \cdot (\hat{\mathbf{u}} + \mathcal{M}_S \hat{\beta}) d\Omega - \int_{\Gamma_N} \mathbf{T}_N \cdot \hat{\mathbf{u}} d\Gamma = 0 \quad \forall (\hat{\mathbf{u}}, \hat{\beta}) \in \mathcal{V} \end{aligned} \quad (2.11)$$

El segundo término de la izquierda en la Ec. (2.11) ($\int_S \mathbf{T} \cdot \hat{\beta} dS$), se activa sólo a partir del instante de nucleación t_N y tiene en cuenta la potencia virtual interna producida por la tracción cohesiva \mathbf{T} actuando sobre un salto virtual cinemáticamente admisible en la fisura $\hat{\beta}$.

Para definir completamente el problema mecánico variacional en la macroescala (Ec. (2.11)) se deben incorporar aún las relaciones constitutivas para los esfuerzos internos generalizados $\boldsymbol{\sigma}$ y \mathbf{T} . La aproximación mecánica convencional de tipo *monoescala* considera modelos fenomenológicos para describir tales esfuerzos. Por el contrario, en nuestra propuesta se establece que ambas respuestas constitutivas se obtienen a través de un análisis micromecánico (mediante la resolución de un problema específico a nivel del RVE) y posterior homogeneización del comportamiento constitutivo micro. Esta técnica multiscala se describe en detalle en los dos Capítulos siguientes.

En general, la respuesta constitutiva macro será no-lineal. Por ello, hace falta poner en evidencia la dependencia funcional existente entre los esfuerzos internos generalizados $\{\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{T}\}$ y la *historia* de la cinemática macro generalizada, hasta el instante de tiempo actual t :

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathcal{F}^\sigma(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^t) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus S \quad \wedge \quad \forall t \in [0, t_F] \quad (2.12)$$

$$\mathbf{T} = \mathcal{F}^T(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^t, \{\beta\}^t) \quad \forall \mathbf{x} \in S \quad \wedge \quad \forall t \in [t_N, t_F] \quad (2.13)$$

donde $\{(\bullet)\}^\chi$ representa la historia de una variable cinemática genérica (\bullet) hasta el tiempo χ , mientras que \mathcal{F}^σ y \mathcal{F}^T identifican los funcionales constitutivos homogeneizados para las tensiones y tracciones, respectivamente.

Adoptando un formato incremental, el estado de tensión y las tracciones cohesivas pueden expresarse como:

$$\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{t-dt} + d\boldsymbol{\sigma} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^{t-dt} + d\mathbf{T} \quad (2.15)$$

donde la operación $(\bullet)^\chi$ refiere al valor que toma una variable genérica (\bullet) al instante de tiempo χ . Con el propósito de simplificar la notación, no se coloca el superíndice para el instante de tiempo actual (t).

Considerando las Ecs. (2.12) y (2.14) y las Ecs. (2.13) y (2.15), los incrementos de esfuerzos internos generalizados pueden escribirse simbólicamente como:

$$d\boldsymbol{\sigma} = {}^*\mathcal{F}^\sigma(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}, d\boldsymbol{\varepsilon}_R) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus S \quad \wedge \quad \forall t \in [0, t_F] \quad (2.16)$$

$$d\mathbf{T} = {}^*\mathcal{F}^T(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}, \{\beta\}^{t-dt}, d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\beta) \quad \forall \mathbf{x} \in S \quad \wedge \quad \forall t \in [t_N, t_F] \quad (2.17)$$

donde se observa claramente la dependencia funcional de un estado mecánico previo ($\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}$ y $\{\beta\}^{t-dt}$) e incrementos cinemáticamente admisibles ($d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ y $d\beta$). En este punto se puede colocar el siguiente concepto fundamental de nuestra aproximación:

“La formulación multiscala presente asume que los funcionales constitutivos ${}^*\mathcal{F}^\sigma$ y ${}^*\mathcal{F}^T$, que definen los incrementos de esfuerzos internos generalizados $d\boldsymbol{\sigma}$ y $d\mathbf{T}$ respectivamente, se obtienen vía un procedimiento de salto de escala consistente (ver Cap. 3 y Cap. 4). Las respuestas homogeneizadas ${}^*\mathcal{F}^\sigma$ y

* \mathcal{F}^T quedarán íntegramente caracterizadas si se conoce la historia de cinemática generalizada $(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}, \{\boldsymbol{\beta}\}^{t-dt})$ y los incrementos cinemáticamente admisibles $(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta})$, aplicados a la microestructura”.

Observe que, según las Ecs. (2.13) y (2.17), la tracción cohesiva \boldsymbol{T} depende de la deformación regular $\boldsymbol{\varepsilon}_R$. No obstante, se recuerda que \boldsymbol{T} sólo produce potencia virtual interna sobre las variaciones virtuales cinemáticamente admisibles del salto o apertura de fisura ($\hat{\boldsymbol{\beta}}$). De esta manera, la componente regular $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ en el argumento del funcional Ec. (2.13), actúa simplemente como un parámetro en lo que respecta a la evaluación de la potencia virtual interna cohesiva. En el Cap. 4 se hará uso de este argumento mecánico.

2.5. Criterio de falla en la macroescala

A partir de las discusiones elaboradas en las secciones previas, surge la necesidad de contar con un criterio específico para decidir “cuándo” y “cómo” se debe introducir la fisura cohesiva, \mathcal{S} , en el dominio Ω . Este criterio debe ser capaz de evaluar el estado mecánico de la microestructura subyacente (en particular, el estado mecánico *homogeneizado*) y ofrecer, como resultado, la siguiente información:

- (i) El tiempo de nucleación $t_N \in [0, t_F]$, definido como el instante ($t = t_N$) en el que se alcanza la condición admisible para la formación de un modo macro localizado (inestabilidad material o bifurcación), por primera vez en la historia de carga.
- (ii) La orientación local de la fisura, a través del vector unitario \boldsymbol{n} normal a la superficie de discontinuidad \mathcal{S} .

Para lograr este objetivo, se propone utilizar el análisis clásico de bifurcación discontinua, basado en estudiar las propiedades espectrales del *Tensor de Localización* (a definirse más abajo, Rice, 1976; Rice y Rudnicki, 1980; Runesson et al., 1991). Este criterio determina la condición mecánica para la cual resulta admisible una discontinuidad en el incremento de deformación, a través de una interfaz material.

La ecuación de compatibilidad o restricción cinemática de Maxwell (Thomas, 1961; Hill, 1962; Rice y Rudnicki, 1980; Sánchez, 2006) establece que una discontinuidad o salto en el incremento de deformaciones ($d\boldsymbol{\varepsilon}$) debe tener, necesariamente, la siguiente estructura matemática:

$$[[d\boldsymbol{\varepsilon}]] = d\boldsymbol{\gamma} \otimes^s \boldsymbol{n} \quad (2.18)$$

donde \boldsymbol{n} es el vector unitario normal a la superficie de discontinuidad y $d\boldsymbol{\gamma}$ es un vector (adimensional) que define la dirección de discontinuidad en el modo localizado.

El término $[[d\boldsymbol{\varepsilon}]]$ representa un salto en el incremento de deformaciones entre dos puntos, L y C , ubicados a cada lado de la interfaz de discontinuidad, de tal forma que:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_L = d\boldsymbol{\varepsilon}_C + [[d\boldsymbol{\varepsilon}]] \quad (2.19)$$

donde las magnitudes $d\boldsymbol{\varepsilon}_L$ y $d\boldsymbol{\varepsilon}_C$ representan el incremento de deformación en la parte *Localizada* y *Continua* del sólido, respectivamente.

En este trabajo se asume un comportamiento mecánico incrementalmente lineal (abarcando de esta forma una gran familia de leyes constitutivas independientes de la velocidad de carga), por lo tanto es posible escribir:

$$d\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{C}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t) : d\boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.20)$$

donde \boldsymbol{C} es el tensor constitutivo tangente el cual depende de la historia de deformación, $\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t$, hasta el instante t .

Postulando la condición de equilibrio a través de \mathcal{S} , en términos de la continuidad de tracciones incrementales, se obtiene que:

$$[[d\boldsymbol{T}]] = \mathbf{0} = [[d\boldsymbol{\sigma}]] \cdot \boldsymbol{n} = d\boldsymbol{T}_L - d\boldsymbol{T}_C = (\boldsymbol{C}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t) : [[d\boldsymbol{\varepsilon}]]) \cdot \boldsymbol{n} \quad (2.21)$$

donde las variables $d\mathbf{T}_L$ y $d\mathbf{T}_C$ representan el incremento de tracción en la parte *Localizada* y *Continua* del cuerpo, respectivamente. Para obtener la última igualdad en la Ec. (2.21), se ha considerado: (i) la Ec. (2.20) y (ii) el mismo comportamiento constitutivo incremental (en régimen de carga) a ambos lados de la superficie material \mathcal{S} , ver [Ottosen y Runesson \(1991\)](#) para obtener detalles adicionales.

En el presente contexto de modelado multiescala, las magnitudes $d\mathbf{T}_L$ y $d\mathbf{T}_C$, en la Ec. (2.21), se obtienen mediante homogeneización de un problema micromecánico. Además, el tensor \mathbf{C} se interpreta como el tensor tangente constitutivo homogeneizado (ver Sec. 3.11).

Considerando la Ec. (2.18) y teniendo en cuenta la simetría menor en \mathbf{C} , la Ec. (2.21) resulta:

$$[(\mathbf{C}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t) \cdot \mathbf{n}) \cdot d\boldsymbol{\gamma}] \cdot \mathbf{n} = \mathbf{Q}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t, \mathbf{n}) \cdot d\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{0} \quad (2.22)$$

donde $\mathbf{Q}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t, \mathbf{n})$ es el denominado *Tensor de Localización*²:

$$\mathbf{Q}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t, \mathbf{n}) = \mathbf{n} \cdot \mathbf{C}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t) \cdot \mathbf{n} \quad (2.23)$$

La Ec. (2.22) puede interpretarse como un problema de valores propios, el cual admite soluciones no triviales ($d\boldsymbol{\gamma} \neq \mathbf{0}$) sólo si:

$$\det(\mathbf{Q}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t, \mathbf{n})) = 0 \quad (2.24)$$

La Ec. (2.24) representa una condición necesaria para la existencia de un modo discontinuo en el incremento de deformaciones ($d\boldsymbol{\varepsilon}$). Según [Oliver y Huespe \(2004a\)](#); [Belytschko et al. \(2003\)](#) también puede interpretarse como una condición necesaria para la existencia de una discontinuidad en el incremento de desplazamiento ($d\mathbf{u}$), a través de una superficie material \mathcal{S} con normal \mathbf{n} .

A partir de lo mencionado en el párrafo anterior, el criterio de nucleación adoptado en esta tesis postula que una fisura cohesiva se activa en la macroescala cuando se verifica, por primera vez en la historia de carga, la condición de inestabilidad dada por Ec. (2.24), para algún vector $\mathbf{n} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}$. Queda así determinado el instante de nucleación t_N y la orientación de la fisura en términos de su vector normal \mathbf{n} . La inexistencia de una solución Real (\mathbb{R}) para la Ec. (2.24), significa que el punto en estudio se mantiene en un estado estable, sin activación de fisura.

En general, para tensores constitutivos \mathbf{C} que poseen simetría mayor, si existe solución para la Ec. (2.24), ésta consiste en dos vectores propios conjugados: el vector normal a la fisura \mathbf{n} y el vector $d\boldsymbol{\gamma}$ que indica la dirección inicial de apertura de fisura ([Oliver et al., 2010](#)). Para referencia futura, la solución del problema de bifurcación material se simboliza conceptualmente mediante: $\mathbb{S}_N = \{t_N, \mathbf{n}, d\boldsymbol{\gamma}\}$. Debe quedar claro que, si existe la solución $\mathbb{S}_N = \{t_N, \mathbf{n}, d\boldsymbol{\gamma}\}$, en general ésta será diferente de un punto a otro. Así, la fisura macro \mathcal{S} propaga en el tiempo y en el espacio de acuerdo a la sucesión de valores $\{t_N(\mathbf{x}), \mathbf{n}(\mathbf{x})\}$ para diferentes puntos $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$.

2.6. Respuesta constitutiva multiescala completa (FMOF)

La técnica multiescala planteada en esta tesis divide la respuesta del problema macro en dos regímenes mecánicos claramente diferenciados a partir del instante (t_N) de nucleación de la fisura cohesiva macro, a saber: (i) régimen estable ($t < t_N$) y (ii) régimen inestable ($t > t_N$). Así, la solución al problema de equilibrio macro requiere la definición de dos modelos multiescalas diferentes. Cada uno de ellos se describen conceptualmente a continuación:

- Un Modelo Multiescala Clásico (MMCI) para la parte regular del dominio macro, es decir durante el régimen estable material (ver Cap. 3 y Cuadro 3.1 para mayores detalles):

$$- \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S} \wedge \forall t \in [0, t_N],$$

²En un sistema de referencia cartesiano, definido por los vectores base $\{\mathbf{e}_i\}$ ($i=1, \dots, \text{ndim}$), el Tensor de Localización tiene la siguiente estructura: $\mathbf{Q} = (\mathbf{n})_i (\mathbf{C})_{ijkl} (\mathbf{n})_l \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k$, donde $(\bullet)_{i,j, \dots}$ indica la componente cartesiana i, j, \dots del objeto (\bullet) . En la expresión previa se considera la convención de sumatoria sobre índices repetidos

- Dada la historia de deformación regular, $\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}$, y un incremento cinemáticamente admisible de la deformación regular, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, obtener la tensión (incremental) homogeneizada, $d\boldsymbol{\sigma}$.
- Un Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo) para los puntos ubicados sobre la fisura macro, es decir durante el régimen inestable material (ver Cap. 4 y Cuadro 4.1 para mayores detalles):
 - $\forall \boldsymbol{x} \in \mathcal{S} \wedge \forall t \in [t_N, t_F]$,
 - Dada la historia de deformación generalizada, $(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}, \{\boldsymbol{\beta}\}^{t-dt})$, e incrementos cinemáticamente admisibles, $(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta})$, obtener el vector tracción (incremental) homogeneizado, $d\boldsymbol{T}$.

La aproximación multiescala propuesta en esta tesis, denominada *Formulación Multiescala Orientada a Falla* (FMOF), se basa en un acoplamiento secuencial y mecánicamente consistente entre los modelos MMCI y MMCo, al tiempo t_N . En particular el procedimiento referenciado como MMCo (Modelo Multiescala Cohesivo) representa el aporte original del trabajo. Para clarificar ideas, la Fig. 2.4 muestra un esquema conceptual de la respuesta constitutiva completa, para un punto \boldsymbol{x} ; el cual, a partir de t_N , nuclea una fisura cohesiva macro.

Por conveniencia, en el Cuadro 2.1 se resumen los ingredientes básicos que definen el problema mecánico macro con discontinuidades fuertes, propuesto en esta tesis.

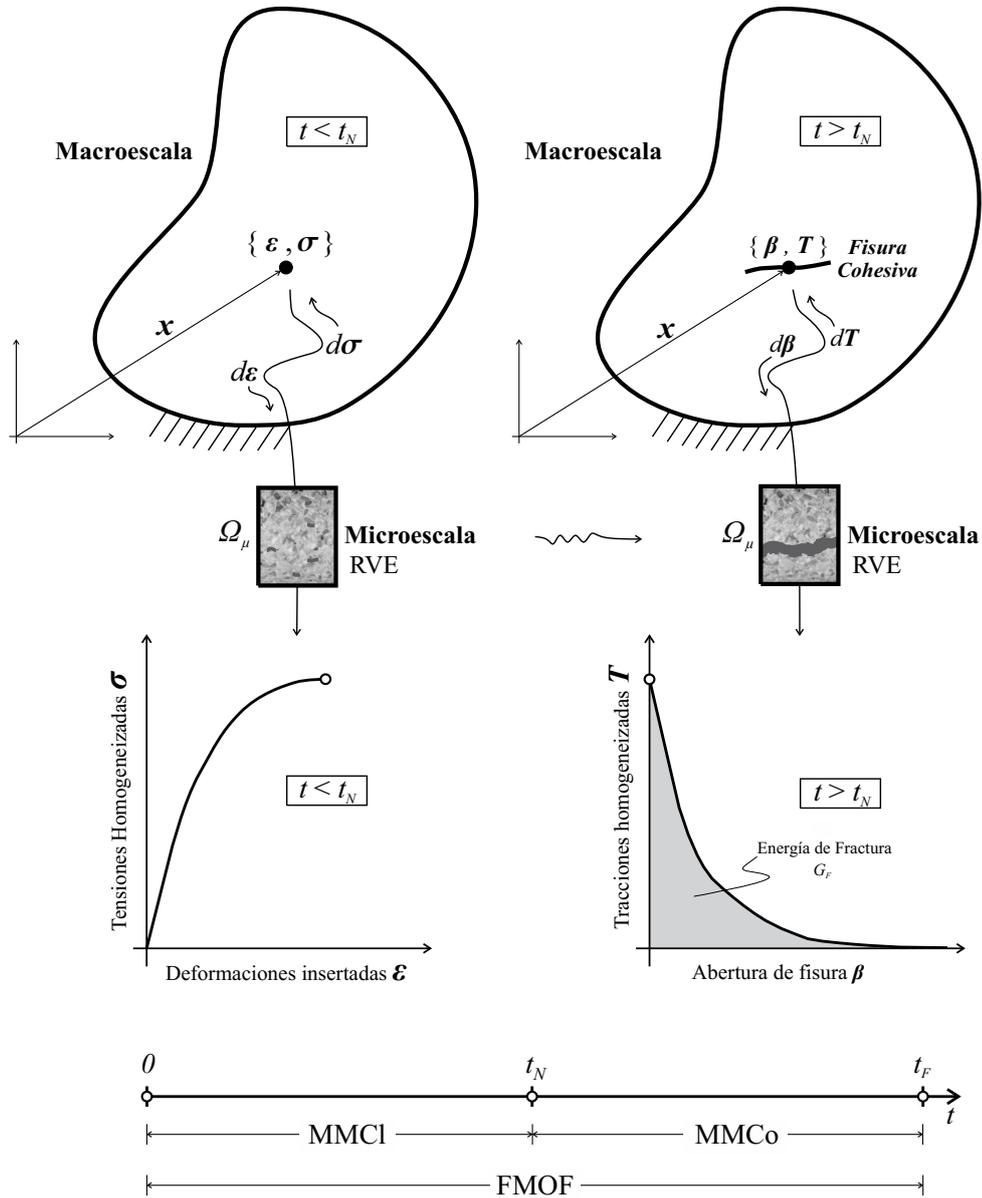


Figura 2.4: Esquema de la respuesta constitutiva completa para la formulación multiescala propuesta (FMOF).

(i) Cinemática:

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &= \bar{\mathbf{u}} + \mathcal{M}_S \boldsymbol{\beta} & ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \\ \boldsymbol{\varepsilon} &= \boldsymbol{\varepsilon}_R = \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \bar{\mathbf{u}} + \mathcal{M}_S \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta} \otimes^s \nabla_{\mathbf{x}} \varphi & ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S} \end{aligned}$$

$$(\bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\beta}) \in \mathcal{U} ; \quad \mathcal{U}(\Omega) \equiv \left\{ (\bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\beta}) \mid \bar{\mathbf{u}} \in \mathbf{H}^1(\Omega) \wedge \boldsymbol{\beta} \in \mathbf{H}^1(\Omega^\varphi) \wedge \bar{\mathbf{u}}|_{\Gamma_D} = \mathbf{u}_D \right\}$$

(ii) Variaciones Virtuales Cinemáticamente admisibles:

$$\hat{\mathbf{u}} = \hat{\bar{\mathbf{u}}} + \mathcal{M}_S \hat{\boldsymbol{\beta}} \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega$$

$$(\hat{\bar{\mathbf{u}}}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \in \mathcal{V} ; \quad \mathcal{V}(\Omega) \equiv \left\{ (\hat{\bar{\mathbf{u}}}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \mid \hat{\bar{\mathbf{u}}} \in \mathbf{H}^1(\Omega) \wedge \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbf{H}^1(\Omega^\varphi) \wedge \hat{\bar{\mathbf{u}}}|_{\Gamma_D} = \mathbf{0} \right\}$$

(iii) Problema variacional de equilibrio:

Dado \mathbf{b} y \mathbf{T}_N ; hallar $(\bar{\mathbf{u}}, \boldsymbol{\beta}) \in \mathcal{U}$ tal que:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \setminus \mathcal{S}} \boldsymbol{\sigma} : \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s (\hat{\bar{\mathbf{u}}} + \mathcal{M}_S \hat{\boldsymbol{\beta}}) d\Omega + \int_{\mathcal{S}} \mathbf{T} \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} d\mathcal{S} - \\ - \int_{\Omega \setminus \mathcal{S}} \mathbf{b} \cdot (\hat{\bar{\mathbf{u}}} + \mathcal{M}_S \hat{\boldsymbol{\beta}}) d\Omega - \int_{\Gamma_N} \mathbf{T}_N \cdot \hat{\bar{\mathbf{u}}} d\Gamma = 0 \quad ; \quad \forall (\hat{\bar{\mathbf{u}}}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) \in \mathcal{V} \end{aligned}$$

(iv) Respuesta constitutiva mediante Formulación Multiescala Orientada a la Falla (FMOF):

1. $\forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S} \wedge \forall t \in [0, t_N]$: Dada la historia previa de deformación regular, $\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}$, y un incremento cinemáticamente admisible de la deformación regular, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, obtener la tensión (incremental) homogeneizada, $d\boldsymbol{\sigma}$, haciendo uso del Modelo Multiescala Clásico (MMCl, ver Cap. 3 y Cuadro 3.1). Luego, el estado de tensión total se evalúa mediante: $\boldsymbol{\sigma} = \boldsymbol{\sigma}^{t-dt} + d\boldsymbol{\sigma}$.
2. $\forall \mathbf{x} \in \mathcal{S} \wedge \forall t \in [t_N, t_F]$: Dada la historia previa de deformación generalizada, $(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}, \{\boldsymbol{\beta}\}^{t-dt})$, e incrementos cinemáticamente admisibles, $(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta})$, obtener el vector tracción (incremental) homogeneizado, $d\mathbf{T}$, haciendo uso del Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo, ver Cap. 4 y Cuadro 4.1). Luego, la tracción total se evalúa mediante: $\mathbf{T} = \mathbf{T}^{t-dt} + d\mathbf{T}$.

(v) Criterio para nucleación de fisura:

Encontrar la solución $\mathbb{S}_N = \{t_N, \mathbf{n}, d\boldsymbol{\gamma}\}$, tal que se verifique la singularidad del Tensor de Localización:

$$\det(\mathbf{Q}(\{\boldsymbol{\varepsilon}\}^t, \mathbf{n})) = 0$$

donde \mathbf{C} es el tensor constitutivo tangente homogeneizado, obtenido por medio del Modelo Multiescala Clásico (Cap. 3).

Cuadro 2.1: Problema mecánico macro con discontinuidades fuertes. Conceptos básicos e ingredientes.

Capítulo 3

Modelo multiescala para el régimen estable del material

3.1. Preliminares

El modelo adoptado para obtener la respuesta constitutiva durante el régimen estable del material macro se denomina: *Modelo Multiescala Clásico* (MMCI). Esta terminología se debe a que, en la actualidad, representa un procedimiento convencional de homogeneización, ampliamente aceptado para el modelado de materiales heterogéneos que no están sometidos a procesos de degradación y falla.

Las implicancias teóricas de esta metodología son bien conocidas y están completamente desarrolladas en la literatura. No obstante, se incluye la descripción del modelo MMCI por las siguientes razones puntuales: (i) para proveer una presentación autocontenida, dado que el MMCI es un ingrediente importante de la formulación multiescala propuesta, (ii) para introducir la nomenclatura y definiciones que servirán de base para los desarrollos posteriores, y (iii) para proponer una generalización del MMCI que nos permita derivar escenarios de modelado multiescala más sofisticados desde un punto de vista mecánico, como por ejemplo el modelado de falla material.

El formato en que se presenta los fundamentos del MMCI sigue los lineamientos elaborados en las contribuciones de [De Souza Neto y Feijóo \(2006, 2008, 2011\)](#). En estos trabajos se postula una visión puramente cinemática y variacional, la cual se adopta (y adapta) como filosofía básica de modelado.

A partir de la lectura de este capítulo podrá apreciarse una clara *axiomatización* en el planteo del problema. En este sentido, nuestro enfoque se basa en introducir sólo tres hipótesis de partida fundamentales para definir íntegramente la metodología:

- Definición de la cinemática a nivel micro en términos de una *Inserción* de la magnitud cinemática macro y términos fluctuantes (ver Sec. [3.3](#)).
- Introducción del concepto de *Admisibilidad Cinemática* entre las descripciones macro y micro (homogeneización de deformaciones) (ver Sec. [3.4](#)).
- Introducción del concepto de *Admisibilidad Energética* entre las descripciones macro y micro (principio variacional de Hill-Mandel) (ver Sec. [3.5](#)).

Luego, una vez colocado este marco formal teórico, mediante simples argumentos de cálculo variacional es posible obtener las consecuencias derivadas del modelo, a saber:

- El procedimiento de homogeneización de tensiones (ver Sec. [3.6](#)).
- El problema de equilibrio variacional a nivel micro (ver Sec. [3.7](#)).

Desde nuestro punto de vista, la correcta axiomatización de la teoría subyacente es un tópico de fundamental importancia para entender profundamente el problema y para poder proponer aportes originales

en la materia. Salvo pocas excepciones, no es práctica común en la literatura actual presentar los modelos multiescalas desde este enfoque conceptual.

El modelo MMCI está específicamente direccionado a brindar la respuesta homogeneizada para dos regímenes particulares del sólido macro:

- Durante la historia de carga completa: para aquellos puntos \mathbf{x} de la escala macro que “no” nuclean una fisura cohesiva, de acuerdo al criterio discutido en la Sec. 2.5.
- Durante el período de estabilidad material: para aquellos puntos \mathbf{x} de la macro escala que “sí” nuclean una fisura cohesiva, de acuerdo al criterio discutido en la Sec. 2.5.

Luego, para el contexto de análisis a plantear en este capítulo, sólo la deformación regular macro $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ y la tensión macro $\boldsymbol{\sigma}$, ambas variables asociadas a un punto genérico $\mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S}$, son las magnitudes mecánicas con sentido físico durante el régimen estable material.

3.2. Premisas básicas adoptadas para el modelo en la microescala

A continuación se enumeran las suposiciones y definiciones básicas a partir de las cuales se fundamenta la descripción del problema mecánico en la microescala, a saber:

- (i) Se utiliza extensivamente la simbología $(\bullet)_\mu$ para denotar un objeto genérico (\bullet) relacionado con la microescala (campo, dominio, frontera, etc). También se adopta la representación $|(\bullet)|$ indicando la medida de un dominio genérico (\bullet) del espacio $(\mathbb{R}^{\text{ndim}})$.
- (ii) La porción microestructural en estudio se identifica con un cuerpo \mathcal{B}_μ de puntos materiales. En la microescala, un punto genérico de \mathcal{B}_μ se denota como “ \mathbf{y} ”¹ (ver Fig. 3.1).
- (iii) Esencialmente, el cuerpo \mathcal{B}_μ es heterogéneo y está constituido por diferentes fases materiales, defectos, poros, huecos, fibras, etc. Según ésto, la definición concreta del tamaño microestructural a seleccionar debe garantizar *Representatividad Estadística*, es decir satisfacer la definición de RVE.
- (iv) La descripción cinemática micro se plantea considerando hipótesis de pequeñas deformaciones. Luego, es posible utilizar una única configuración para el cuerpo \mathcal{B}_μ , denotada como Ω_μ (*la configuración de referencia*). El símbolo Ω_μ representa una subregión (abierta y acotada) del espacio Euclídeo de puntos $(\mathbb{R}^{\text{ndim}})$, que tiene correspondencia biunívoca con \mathcal{B}_μ . La frontera del dominio Ω_μ , supuesta suave por partes, se simboliza mediante Γ_μ y posee vector unitario normal (saliente) \mathbf{v}_μ , ver Fig. 3.1.
- (v) La excitación mecánica en la microescala se debe, exclusivamente, a la imposición de deformaciones que provienen desde la escala macro.
- (vi) En Ω_μ , se asume una descripción mecánica convencional (medio local y continuo), por lo tanto el estado mecánico de un punto \mathbf{y} viene caracterizado por la tensión micro $\boldsymbol{\sigma}_\mu$ y la deformación micro $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$. Para modelar la relación $\{\boldsymbol{\sigma}_\mu, \boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}$ se consideran leyes constitutivas convencionales, las cuales incorporan ablandamiento, degradación y falla material.
- (vii) Se utiliza la *Aproximación de Fisura Difusa (Smearred Crack Approach, SCA, [Rots et al. 1985; Oliver et al. 1990])*, para regularizar el comportamiento de ablandamiento material a nivel micro. Si bien la idea sustancial detrás de nuestra propuesta multiescala se puede extender a diferentes esquemas de regularización constitutiva², los desarrollos presentes consideran la técnica SCA debido a su simplicidad conceptual.

¹Con cierto abuso de notación, se utilizará la misma simbología “ \mathbf{y} ” para representar las *coordenadas* del punto material respecto a un sistema de referencia específico, definido en la microescala. Los sistemas coordenados en la macro y micro escala son diferentes.

²Como por ejemplo fisura cohesiva micro, modelos no locales, de gradientes de alto orden, etc.

- (viii) Con el parámetro “ t ” se simboliza la misma variable de *pseudo-tiempo* utilizada en la macroescala, que llevará en cuenta el proceso no lineal material a nivel micro.

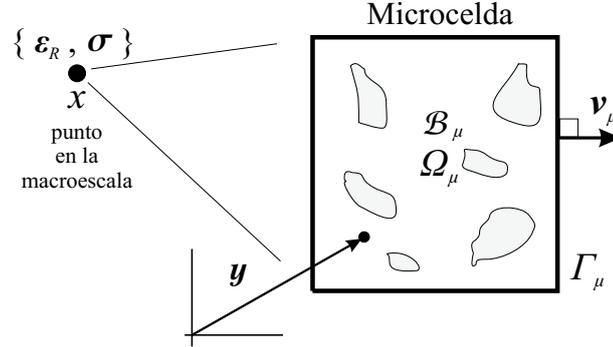


Figura 3.1: Esquema de microcelda en régimen estable del material.

Todas las consideraciones enunciadas en la lista previa, no sólo tienen validez para el desarrollo del modelo MMCI a discutir en este capítulo, sino también para el modelo multiescala propuesto durante la etapa inestable cohesiva material (MMCo), a desarrollar en el capítulo próximo.

3.3. Definición Cinemática en la microescala: Hipótesis N°1

Considere que el tensor $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ representa el incremento de deformación macro regular, *evaluado en un punto específico “ x ” de la escala macro y para un instante específico “ t ” de análisis* (ver la Ec. (2.8)), es decir $d\boldsymbol{\varepsilon}_R \in \mathcal{S}$, donde \mathcal{S} identifica el espacio de tensores simétricos de segundo orden. Se postula como primera hipótesis de partida que la deformación incremental micro, denotada como $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, puede definirse como la suma de dos contribuciones:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) + d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (3.1)$$

donde $\mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R)$ simboliza un *procedimiento de Inserción* aplicado a la magnitud $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ mientras que $d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ representa un campo de (incrementos de) deformaciones micro fluctuantes. De aquí en adelante se utiliza la nomenclatura $(\tilde{\bullet})_\mu$ para señalar la contraparte *fluctuante* de un campo genérico micro $(\bullet)_\mu$.

El primer término del lado derecho de la Ec. (3.1) tiene un significado mecánico importante: postula la existencia de un *Operador de Inserción*, $\mathcal{I}_y(\bullet)$, que aplica sobre una variable macro *valuada en un punto*, y la distribuye con algún criterio sobre el dominio Ω_μ . En este caso toma el “*tensor-valuado*” $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ y lo transforma en el “*campo tensorial*” $\mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R)$, definido en todo punto y de la microescala, de allí el subíndice y en $\mathcal{I}_y(\bullet)$.

El procedimiento de inserción debiera considerarse como un grado de libertad de la formulación multiescala, que permite establecer diferentes descripciones cinemáticas en la escala micro. Como se verá en el próximo capítulo, esta noción se utiliza para derivar formulaciones multiescalas alternativas.

Existen dos propiedades que debe satisfacer $\mathcal{I}_y(\bullet)$, a saber: (i) linealidad respecto a su argumento y (ii) conservar, en media, la magnitud cinemática descrita en la macroescala, en el siguiente sentido general:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu^*|} \int_{\Omega_\mu^*} \mathcal{I}_y(\bullet) d\Omega_\mu = (\bullet) \quad \forall (\bullet) \quad (3.2)$$

siendo Ω_μ^* el dominio en donde $\mathcal{I}_y(\bullet)$ está definido. La Ec. (3.2) debe interpretarse como una restricción sobre posibles definiciones para el operador $\mathcal{I}_y(\bullet)$. Utilizando un lenguaje algo informal, la Ec. (3.2) establece que debe permanecer inalterable, no puede *aumentar* ni *disminuir*, el valor medio de la magnitud cinemática que se transfiere a la microescala durante el proceso de inserción.

En el contexto presente, relacionado al régimen estable (continuo) del material macro ($x \in \Omega \setminus \mathcal{S}$, $t < t_N$), la inserción cinemática con más fundamento físico parece ser una distribución homogénea de

la deformación macro en el dominio microestructural Ω_μ . Según esto, se define trivialmente el operador $\mathcal{I}_y(\bullet)$ como sigue:

$$\mathcal{I}_y(\bullet) = \mathbb{I} : (\bullet) = (\bullet) \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \quad (3.3)$$

donde \mathbb{I} representa el tensor identidad de cuarto orden³

A partir de las Ecs. (3.1) y (3.3), el incremento de deformación micro adquiere la expresión (y descomposición) utilizada comúnmente en la literatura:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = d\boldsymbol{\varepsilon}_R + d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (3.4)$$

La deformación micro total $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$ se obtiene simplemente como:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}_\mu^{t-dt} + d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}_\mu^{t-dt} + \mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) + d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \boldsymbol{\varepsilon}_\mu^{t-dt} + d\boldsymbol{\varepsilon}_R + d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (3.5)$$

Según las Ecs. (3.1) y (3.4), una variación virtual cinemáticamente admisible de deformaciones micro, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$, se expresa mediante:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \mathcal{I}_y(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R) + \hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R + \hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu \quad (3.6)$$

Para completar la descripción cinemática en Ω_μ , se debe introducir aún la estructura que adopta el término $d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$. En este punto se incorpora la noción mecánica tradicional de *compatibilidad cinemática*⁴ aplicada a los campos de fluctuaciones. Así se puede escribir:

$$d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \quad (3.7)$$

donde $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ identifica al campo (incremental) de desplazamiento micro fluctuante y $\nabla_{\mathbf{y}}$ es el operador gradiente asociado al sistema coordenado micro, de allí el subíndice \mathbf{y} . Como se verá en este capítulo, el campo $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ representa la variable primaria del problema mecánico en la microescala.

Cabe mencionar aquí que, si bien existe un campo de desplazamiento micro total \mathbf{u}_μ , no es necesario especificarlo, ya que en una formulación *multiescala constitutiva* sólo interesan los gradientes de \mathbf{u}_μ .

3.4. Admisibilidad Cinemática: Hipótesis N°2

A nivel micro, se dice que el tensor de deformación incremental, $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, es *Cinemáticamente Admisible* con respecto al incremento de deformación macro regular, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, si para el operador de inserción $\mathcal{I}_y(\bullet)$ definido en la Ec. (3.3), se satisface:

$$\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) d\Omega = \int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu d\Omega \quad (3.8)$$

Cada procedimiento independiente de inserción cinemática, conlleva asociado un requerimiento de *Admisibilidad*. Durante el régimen estable macroscópico, la única variable cinemática macro existente es $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, que se distribuye en todo dominio Ω_μ de la microcelda. Por lo tanto se debe incorporar una única restricción (tensorial), que en este caso viene dada por la Ec. (3.8)⁵.

³Si se adopta un sistema de referencia cartesiano, con vectores base $\{\mathbf{e}_i\}$ ($i=1, \dots, \text{ndim}$), entonces:

$$\mathbb{I} = \frac{1}{2} \left(\delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk} \right) \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$$

donde δ_{ij} es el operador Delta de Kronecker.

⁴Advierta la diferencia conceptual entre los términos *Compatibilidad* y *Admisibilidad* cinemática. El primero de ellos se refiere la *Compatibilidad* entre el campo de desplazamientos y el campo de deformaciones, que se materializa típicamente a través un operador diferencial (gradiente simétrico en pequeñas deformaciones). El segundo en cambio es más amplio y abstracto, involucrando la definición de los conjuntos/espacios funcionales en donde dichos campos están formalmente definidos.

⁵Si se multiplican ambos miembros de la Ec. (3.8) por el factor $\frac{1}{|\Omega_\mu|}$, esta restricción se interpreta como una equivalencia entre los valores promedios del incremento de la deformación $\mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R)$ insertada y el de la deformación en la microescala $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$.

A partir de las Ecs. (3.8) y (3.3), es posible escribir:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_R = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu d\Omega \quad (3.9)$$

La Ec. (3.9) es reconocida en la literatura como el “Principio de Homogeneización de Deformaciones”. Sin embargo, desde nuestra perspectiva, la expresión de la Ec. (3.9) no es un “principio” estrictamente hablando sino una consecuencia del *Concepto de Admisibilidad Cinemática*, dado por la restricción de la Ec. (3.8). Aunque esta discusión parezca una sutileza, tiene importancia al momento de generalizar ideas. Advierta que la Ec. (3.9) asume implícitamente un procedimiento de inserción homogéneo, por ende cualquier otro mecanismo produce una fórmula de homogeneización de deformaciones distinta a la expresada por la Ec. (3.9). La utilización de estos conceptos generales quedarán aún más en evidencia en el capítulo próximo.

Teniendo en cuenta las Ecs. (3.4) y (3.7), la Ec. (3.9) implica:

$$\int_{\Omega_\mu} d\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega = \int_{\Omega_\mu} \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s d\tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Omega = \mathbf{0} \quad (3.10)$$

Alternativamente, la Ec. (3.10) puede escribirse como una integral definida en la frontera Γ_μ de Ω_μ . Para ello se aplica el Teorema de Stokes Generalizado⁶ obteniendo:

$$\int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \boldsymbol{\nu}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (3.11)$$

donde $\boldsymbol{\nu}_\mu$ es la normal exterior a la frontera Γ_μ (Fig. 3.1).

La Ec. (3.11) establece cuál es la restricción cinemática que debe satisfacer el campo $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$. Se puede definir entonces el espacio vectorial de desplazamientos fluctuantes incrementales micro, \mathcal{U}_μ , como así también el de variaciones virtuales cinemáticamente admisibles, \mathcal{V}_μ , durante la etapa estable del material macro, como sigue:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \boldsymbol{\nu}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \\ \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \boldsymbol{\nu}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Los espacios funcionales definidos en la Ec. (3.12) contienen las *restricciones cinemáticas mínimas* requeridas a nivel del RVE para garantizar la admisibilidad cinemática (Ec. (3.8)). Por ese motivo, la metodología multiscala derivada de la Ec. (3.12) se denomina en este trabajo como submodelo de *Mínima Restricción Cinemática*. No obstante, se pueden seleccionar subespacios de $\mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu)$ y $\mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)$, más restringidos, según el tipo de problema a analizar y las características de la microcelda que se pretende evaluar. En la Sec. 3.10 se describen varios de los submodelos más utilizados en la literatura (como por ejemplo, los submodelos de *Taylor*, *Lineal*, *Periódico*, etc.).

Considerando las Ecs. (3.7) y (3.12) es posible definir el espacio de variaciones virtuales admisibles, \mathcal{D}_μ , para el campo de deformaciones fluctuantes micro ($\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$):

$$\mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \mid \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu \wedge \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \right\} \quad (3.13)$$

El sentido de introducir el espacio \mathcal{D}_μ (Ec. (3.13)) es para describir los desarrollos siguientes en forma más compacta.

⁶En particular, la identidad a aplicar en este caso es: $\int_{\Omega} \frac{\partial v_i}{\partial y_j} d\Omega = \int_{\Gamma_\mu} v_i \nu_j d\Gamma$. En forma invariante y considerando la simetría en la operación, se tiene: $\int_{\Omega} \nabla \otimes^s \mathbf{v} d\Omega = \int_{\Gamma} \mathbf{v} \otimes^s \boldsymbol{\nu} d\Gamma$.

Observe que el enfoque discutido en esta sección posee cierta flexibilidad para transferir información cinemática desde la macroescala hacia la microescala. Esta flexibilidad radica en la definición del operador de inserción $\mathcal{I}_y(\bullet)$ y, finalmente, en el formato que adopta la cinemática micro en deformaciones (Ec. (3.1)). Además, se generaliza el concepto de *Admisibilidad Cinemática*, el cual: (i) deriva en un procedimiento de Homogeneización de Deformaciones y (ii) permite definir la estructura que poseen los espacios vectoriales cinemáticamente admisibles a nivel del RVE.

3.5. Admisibilidad Energética: Hipótesis N°3

Con el fin de garantizar la consistencia energética entre las escalas físicas intervinientes (macro y micro), se introduce como tercer y última hipótesis del modelo el denominado *Principio Variacional de Hill-Mandel*. Su enunciado establece la equivalencia entre la potencia virtual interna en un punto de la macroescala y la media volumétrica de la potencia virtual interna en la microescala. En este trabajo, se coloca una versión generalizada de dicho principio la cual, para el régimen estable del material macro, puede expresarse como sigue⁷:

$$\begin{aligned} \sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) d\Omega \right) &= \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\epsilon}_\mu d\Omega \\ \forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (3.14)$$

donde se recuerda que \mathcal{S} representa el espacio vectorial tensores simétricos de segundo orden.

Teniendo en cuenta la Ec. (3.6), la sentencia variacional de la Ec. (3.14) se expande de la forma:

$$\begin{aligned} \sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) d\Omega \right) &= \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : (\mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) + \hat{\epsilon}_\mu) d\Omega \\ \forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Operando matemáticamente sobre la expresión previa es posible escribir:

$$\begin{aligned} \sigma : \hat{\epsilon}_R - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_{\Omega_\mu} \text{adj} \mathcal{I}_y(\sigma_\mu) d\Omega \right) : \hat{\epsilon}_R - \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\epsilon}_\mu d\Omega &= 0 \\ \forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (3.16)$$

donde $\text{adj} \mathcal{I}_y(\bullet)$ representa el operador adjunto de $\mathcal{I}_y(\bullet)$. En este caso se obtiene trivialmente que: $\text{adj} \mathcal{I}_y(\bullet) = (\bullet)$.

En este punto se argumenta que no hace falta colocar ninguna hipótesis adicional para completar la formulación del modelo MMCI. La expresión de la Ec. (3.16) contiene toda la información necesaria para derivar las ecuaciones restantes del modelo, como se discute a continuación.

3.6. Respuesta mecánica homogeneizada (σ): Consecuencia N°1

La Ec. (3.16) representa una expresión que se debe satisfacer para toda variación virtual cinemáticamente admisible de las variables independientes $\hat{\epsilon}_R$ y $\hat{\epsilon}_\mu$. Asumiendo en primera instancia $\hat{\epsilon}_\mu \equiv \mathbf{0}$ y $\hat{\epsilon}_R$ arbitrario, se obtiene la fórmula de homogeneización de tensiones:

$$\sigma = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \text{adj} \mathcal{I}_y(\sigma_\mu) d\Omega = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu d\Omega \quad (3.17)$$

⁷La forma convencional de escribir el Principio de Hill-Mandel es la siguiente:

$$\underbrace{\sigma : \hat{\epsilon}_R}_{P^{\text{int}}} = \underbrace{\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\epsilon}_\mu d\Omega}_{\text{Promedio de } P_\mu^{\text{int}}} \quad \forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu)$$

la cual, como se esperaba intuitivamente, asigna a la tensión homogeneizada macro el valor medio volumétrico del campo de tensiones a nivel micro. Note sin embargo que la definición del operador de inserción juega un rol fundamental en la forma final que adquiere la técnica de homogeneización de tensiones. Cualquier cambio en $\mathcal{I}_y(\bullet)$, y por ende en la cinemática micro, introduce modificaciones en la regla de homogeneización. Se observa así que la tensión homogeneizada surge vía argumentos de dualidad, una vez incorporadas las hipótesis a nivel cinemático y energético. En numerosos trabajos, la Ec. (3.17) se considera un postulado inicial de modelado. Según el enfoque propuesto la Ec. (3.17) es, necesariamente, una consecuencia.

En forma incremental, la expresión (3.17) se escribe:

$$\sigma^{t-dt} + d\sigma = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (\sigma_\mu^{t-dt} + d\sigma_\mu) d\Omega \quad (3.18)$$

Si en el instante de tiempo previo, denotado como $(t - dt)$, las tensiones se han homogeneizado según la regla anterior (Ec. (3.17)), entonces el incremento de tensión macro ($d\sigma$) resulta:

$$d\sigma = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} d\sigma_\mu d\Omega \quad (3.19)$$

La Ec. (3.19) brinda la respuesta constitutiva requerida para resolver el equilibrio macro en un punto con comportamiento material estable ($x \in \Omega \setminus S$), ver Ec. (2.16) y Cuadro 2.1

3.7. Problema de equilibrio en la microescala: Consecuencia N°2

Alternativamente, considerando ahora $\hat{\varepsilon}_R \equiv \mathbf{0}$ y variaciones virtuales cinemáticamente admisibles de $\hat{\varepsilon}_\mu$, el Principio de Hill-Mandel (ver la Ec. (3.16)) establece:

$$\int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\varepsilon}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\varepsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \quad (3.20)$$

La sentencia variacional previa representa el equilibrio mecánico en la microescala. Considerando Ec. (3.7) y el formato incremental adoptado en este trabajo, el problema micromecánico puede enunciarse en forma equivalente como sigue⁸:

Dada la historia de deformaciones regulares $\{\varepsilon_R\}^{t-dt}$ y un incremento cinemáticamente admisible $d\varepsilon_R$, hallar el incremento de desplazamiento fluctuante micro $d\tilde{u}_\mu \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} d\sigma_\mu(\{\varepsilon_R\}^t) : \nabla_y \otimes^s \hat{u}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{u}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \quad (3.21)$$

El problema de la Ec. (3.21) implica que el incremento de tensiones micro, $d\sigma_\mu$, se encuentra auto-equilibrado, representando las reacciones al sistema de carga generalizado inducido por el procedimiento de inserción $\mathcal{I}_y(d\varepsilon_R)$, en la microcelda. Recuerde además que el problema variacional de equilibrio (Ec. (3.21)) está sujeto a restricciones cinemáticas específicas (ver las definiciones de los espacios \mathcal{U}_μ y \mathcal{V}_μ en Ec. (3.12)), consistentes con la ecuación de homogeneización de deformaciones (Ec. (3.9)). Observe que el problema a nivel del RVE queda formulado en términos de los campos fluctuantes de la cinemática micro.

Con el formato general propuesto, se recupera el *Modelo Multiescala Clásico* ampliamente difundido para la modelación de materiales estables.

⁸Se asume aquí que el problema de equilibrio micro se satisface para el paso de tiempo previo, $(t - dt)$, es decir: $\int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu^{t-dt} : \hat{\varepsilon}_\mu d\Omega = 0, \forall \hat{\varepsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu$.

3.8. Modelo constitutivo en la microescala

Para resolver el problema variacional (Ec. (3.21)) sólo resta definir el comportamiento constitutivo para cada punto \mathbf{y} del RVE. En general, el estado tensional en la microcelda, $\boldsymbol{\sigma}_\mu$, depende de la historia de las deformaciones a través de un funcional \mathcal{F}_μ^σ , de tipo fenomenológico, como se indica a continuación:

$$\boldsymbol{\sigma}_\mu = \mathcal{F}_\mu^\sigma(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) \quad (3.22)$$

donde $\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t$ representa la historia de deformación en la microescala, $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$.

En este trabajo, el funcional \mathcal{F}_μ^σ describe modelos constitutivos (invíscidos) genéricos, que incorporan mecanismos de ablandamiento, degradación y falla material, regularizados.

En el formato incremental, el incremento de tensiones micro se obtiene como:

$$d\boldsymbol{\sigma}_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) = \mathcal{F}_\mu^\sigma(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) - \boldsymbol{\sigma}_\mu^{t-dt} \quad (3.23)$$

3.9. Síntesis del procedimiento multiescala

A partir de los argumentos discutidos en el presente capítulo, es posible resumir el procedimiento axiomático propuesto para el planteamiento formal de una metodología multiescala cinemática y variacionalmente consistente. Para ello considere los siguientes tres pasos:

- (i) Postular la descripción cinemática en la microescala (Sec. 3.3) incorporando la definición del tensor de deformaciones micro $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$. Esto implica tomar la decisión en relación a cómo debe insertarse la deformación macro en el dominio de la microcelda y, en consecuencia, definir la estructura del operador de inserción $\mathcal{I}_y(\bullet)$.
- (ii) Postular el concepto de *Admisibilidad Cinemática* (Sec. 3.4), exigiendo que el campo (incremental) de deformaciones en la microescala, $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, resulte admisible respecto a la cinemática insertada, ambas magnitudes integradas en Ω_μ . De este requerimiento se obtiene un *Procedimiento de Homogeneización de Deformaciones*, el cual caracteriza los espacios variacionales para formular íntegramente el problema mecánico en la microescala).
- (iii) Postular la equivalencia energética entre las escalas macro y micro (*Admisibilidad Energética*, Sec. 3.5), a partir de la utilización del Principio Variacional de Hill-Mandel.

Una vez definido este marco teórico, y siguiendo argumentos puramente variacionales, se obtiene como *consecuencia directa* de la formulación: (i) la medida de las tensiones homogeneizadas y (ii) el tipo de equilibrio mecánico en la microescala.

3.10. Submodelos del MMCI: diferentes condiciones de borde

Según lo planteado en la Sec. 3.4 el concepto de Admisibilidad Cinemática impone restricciones sobre el campo primal $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, las cuales pueden expresarse como condiciones de borde sobre la frontera Γ_μ del RVE (ver Ec. (3.11)). Precisamente, en la Ec. (3.12) se definen los espacios \mathcal{U}_μ y \mathcal{V}_μ de desplazamiento fluctuante incremental ($d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$) y sus variaciones virtuales cinemáticamente admisibles ($\hat{\mathbf{u}}_\mu$), respectivamente. La solución del problema micromecánico de equilibrio depende fuertemente de tales restricciones cinemáticas, véase el enunciado variacional en la Ec. (3.21).

La definición de los espacios $\{\mathcal{U}_\mu, \mathcal{V}_\mu\}$, a través de la Ec. (3.12), conforma la opción admisible *Mínimamente Restringida*. No obstante, es posible seleccionar subespacios de $\{\mathcal{U}_\mu, \mathcal{V}_\mu\}$, cinemáticamente más restringidos, dando origen así a diferentes submodelos multiescalas. Como fue previamente mencionado (ver Sec. 1.6), recuerde que se utiliza la terminología “*submodelo*” para denotar diferentes restricciones o condiciones de borde sobre el problema micro.

A continuación, se describen algunos de los submodelos más conocidos y utilizados en la literatura, todos ellos derivados a partir del planteamiento generalizado propuesto, a saber:

a) Submodelo de *Taylor*:

Este submodelo impone que el (incremento de) desplazamiento fluctuante es nulo para todo punto del RVE. Luego, según la Ec. (3.4), el incremento de deformación micro, $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, es igual al incremento de deformación macro regular impuesta por la macroescala, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, para todo punto de la microescala. Por este motivo, a esta aproximación se la reconoce bajo el nombre de submodelo de deformación constante. Representa la opción más restringida posible y por ende brinda la respuesta mecánica más rígida. Otra denominación comúnmente encontrada en la bibliografía es: *submodelo de teoría de mezclas o de Voigt*.

Para este caso particular, los subespacios vectoriales $\mathcal{U}_\mu^{\text{Tay}}$ y $\mathcal{V}_\mu^{\text{Tay}}$ se expresan como:

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_\mu^{\text{Tay}}(\Omega_\mu) &= \{d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu\} \subseteq \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{\text{Tay}}(\Omega_\mu) &= \{\hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu\} \subseteq \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)\end{aligned}\quad (3.24)$$

b) Submodelo *Lineal*

Este submodelo impone que el incremento de desplazamiento fluctuante es nulo para todo punto de la frontera, Γ_μ , del RVE. Los subespacios vectoriales correspondientes, \mathcal{U}_μ^L y \mathcal{V}_μ^L , se definen de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_\mu^{\text{Lin}}(\Omega_\mu) &= \{d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu\} \subseteq \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{\text{Lin}}(\Omega_\mu) &= \{\hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu\} \subseteq \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)\end{aligned}\quad (3.25)$$

c) Submodelo *Periódico*

En el presente manuscrito, esta restricción cinemática se denota como submodelo *Periódico Clásico*, para diferenciarlo de condiciones de borde periódicas más generales que se definen en la Sec. 6.1.3⁹.

Este submodelo impone que el (incremento de) desplazamiento micro fluctuante ($d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$) sobre los contornos del RVE, opuestos y topológicamente equivalentes, sean iguales.

Para describir matemáticamente este tipo de restricción se adopta la notación utilizada por Miehe et al. (1999). La frontera Γ_μ de la microcelda se divide en dos subconjuntos Γ_μ^+ y Γ_μ^- ($\Gamma_\mu = \Gamma_\mu^+ \cup \Gamma_\mu^-$ y $\Gamma_\mu^+ \cap \Gamma_\mu^- = \emptyset$), con normales geométricas $\boldsymbol{\nu}_\mu^+$ y $\boldsymbol{\nu}_\mu^-$, respectivamente. Los puntos que pertenecen a Γ_μ^+ y Γ_μ^- se representan con \mathbf{y}^+ e \mathbf{y}^- , respectivamente. Se asume que existe una correspondencia uno a uno entre todos los puntos \mathbf{y}^+ e \mathbf{y}^- . Se indica con $\{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\}$ cada par de puntos que satisfacen: $\boldsymbol{\nu}_\mu^+(\mathbf{y}^+) = -\boldsymbol{\nu}_\mu^-(\mathbf{y}^-)$ ¹⁰. Las condiciones de borde periódicas clásicas imponen que: $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-)$, \forall par $\{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\}$. En la Fig. 3.2 se muestran dos ejemplos típicos de microceldas con este tipo de condición de borde.

Según las definiciones previas, los espacios $\mathcal{U}_\mu^{\text{Per}}$ y $\mathcal{V}_\mu^{\text{Per}}$ resultan:

$$\begin{aligned}\mathcal{U}_\mu^{\text{Per}}(\Omega_\mu) &= \{d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\}\} \subseteq \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{\text{Per}}(\Omega_\mu) &= \{\hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\}\} \subseteq \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)\end{aligned}\quad (3.26)$$

La restricción cinemática de periodicidad implica que las tracciones (reacción) en la frontera del RVE son antiperiódicas.

d) Submodelo de *Mínima Restricción Cinemática*

⁹Esta generalización permite definir la dirección de periodicidad en forma arbitraria, incluyendo así el submodelo *Periódico Clásico*.

¹⁰Este requerimiento exige que la geometría de la microcelda tenga ciertas características especiales.

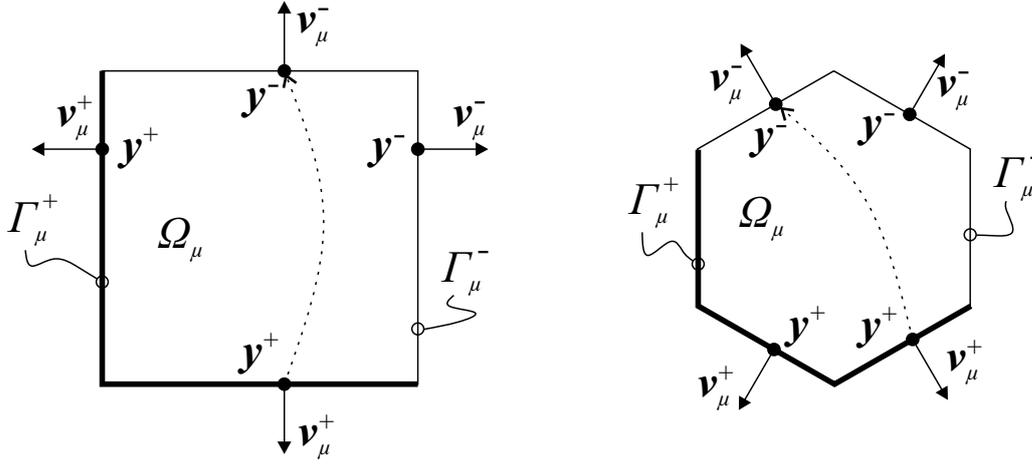


Figura 3.2: Ejemplos de microceldas con condiciones de borde periódicas clásicas (MMCI).

Este submodelo impone las restricciones cinemáticas mínimas tal que se garantice el concepto de Admisibilidad Cinemática (Ec. (3.11)), de allí su nombre. Por tal motivo representa la respuesta más flexible del material homogeneizado¹¹.

Los espacios vectoriales $\mathcal{U}_\mu^{\text{Min}}(\Omega_\mu)$ y $\mathcal{V}_\mu^{\text{Min}}(\Omega_\mu)$ ya han sido definidos en la Ec. (3.12), pero por conveniencia se repiten a continuación:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu^{\text{Min}}(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu \, d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \equiv \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{\text{Min}}(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu \, d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \equiv \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (3.27)$$

En [De Souza Neto y Feijóo \(2006\)](#) se demuestra que bajo esta condición de borde las tracciones en la frontera del RVE verifican la ecuación siguiente:

$$\boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y}) \cdot \mathbf{v}_\mu(\mathbf{y}) = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{v}_\mu(\mathbf{y}) \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu \quad (3.28)$$

Considerando la Ec. (3.28), se tiene que para los segmentos de la frontera con normales \mathbf{v}_μ constantes, las tracciones son uniformes, de allí la denominación comúnmente encontrada en la literatura: *submodelo de tracción uniforme*.

En todos los espacios \mathcal{U}_μ y \mathcal{V}_μ descriptos previamente se asume implícitamente que, además de las restricciones mencionadas, tienen incorporadas las necesarias para restringir el movimiento como cuerpo rígido de la celda unitaria.

A partir de la discusión previa, es posible plantear la siguiente inclusión de subespacios cinemáticos:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu^{\text{Tay}}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{U}_\mu^{\text{Lin}}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{U}_\mu^{\text{Per}}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{U}_\mu^{\text{Min}}(\Omega_\mu) \equiv \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \\ \mathcal{V}_\mu^{\text{Tay}}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{V}_\mu^{\text{Lin}}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{V}_\mu^{\text{Per}}(\Omega_\mu) \subseteq \mathcal{V}_\mu^{\text{Min}}(\Omega_\mu) \equiv \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (3.29)$$

3.11. Tensor tangente constitutivo homogeneizado

La linealización de la respuesta constitutiva homogeneizada de la macroescala (Ec. (3.17) ó bien (3.19)) requiere la determinación del llamado *Tensor Tangente Constitutivo Homogeneizado*, simbolizado

¹¹Esta afirmación es válida en el contexto de los modelos multiescala cinemáticamente compatibles, como los tratados en esta tesis. En general el submodelo de Reuss será el más flexible de todos (tensión uniforme), pero éste no es un método compatible cinemáticamente, sino estáticamente compatible.

mediante C . La razón para ello es doble: (i) el método (estándar) de Newton-Raphson, generalmente adoptado para resolver el problema no lineal acoplado macro-micro, requiere el cómputo de C para obtener una tasa de convergencia cuadrática durante el proceso iterativo y (ii) permite desarrollar un criterio apropiado para evaluar la inestabilidad material de la macroescala, y de este modo, verificar si se alcanza la condición admisible para la nucleación de una fisura cohesiva (ver Sec. 2.5).

En forma convencional, se define la *derivada* $\frac{\partial f}{\partial \mathbf{g}}$, de un campo dado f con respecto a otro campo \mathbf{g} , evaluada en $\mathbf{g} = \mathbf{g}^*$, a la siguiente transformación lineal:

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{g}}(\mathbf{g}^*) \cdot \Delta \mathbf{g} = \lim_{\xi \rightarrow 0} \left(\frac{f(\mathbf{g}^* + \xi \Delta \mathbf{g}) - f(\mathbf{g}^*)}{\xi} \right) = \left. \frac{d}{d\xi} f(\mathbf{g}^* + \xi \Delta \mathbf{g}) \right|_{\xi=0} \quad \forall \Delta \mathbf{g} \neq \mathbf{0} \quad (3.30)$$

donde $\Delta \mathbf{g}$ es un incremento arbitrario no nulo del campo \mathbf{g} a partir de \mathbf{g}^* .

Durante el régimen estable material sólo tiene sentido considerar variaciones de la deformación regular $\boldsymbol{\varepsilon}_R$. Luego, el tensor tangente constitutivo homogeneizado en la macroescala, para un punto $\mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S}$ y $t < t_N$, puede definirse de la siguiente forma:

$$\mathbf{C}(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^t, \mathbf{x}) = \frac{\partial \boldsymbol{\sigma}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_R} = \frac{\partial d\boldsymbol{\sigma}}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_R} \quad (3.31)$$

donde se pone evidencia la dependencia del tensor tangente constitutivo con la historia de deformaciones $(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^t)$ y la posición \mathbf{x} .

Teniendo en cuenta la medida de las tensiones homogeneizadas incrementales, $d\boldsymbol{\sigma}$, dada por la Ec. (3.19), y la definición de la deformación en la microescala $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$ (ver Ec. (3.4)), la Ec. (3.31) puede ser expandida de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \frac{\partial d\boldsymbol{\sigma}}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_R} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \frac{\partial d\boldsymbol{\sigma}_\mu}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_R} d\Omega \\ &= \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \left(\frac{\partial d\boldsymbol{\sigma}_\mu}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu} + \frac{\partial d\boldsymbol{\sigma}_\mu}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu} : \frac{\partial d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_R} \right) d\Omega \\ &= \underbrace{\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{C}_\mu d\Omega_\mu}_{\mathbf{C}_T: \text{Componente de Taylor}} + \underbrace{\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{C}_\mu : \frac{\partial d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_R} d\Omega_\mu}_{\tilde{\mathbf{C}}: \text{Componente fluctuante}} \end{aligned} \quad (3.32)$$

donde $\mathbf{C}_\mu = \frac{\partial d\boldsymbol{\sigma}_\mu}{\partial d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu}$ representa el tensor constitutivo tangente en cada punto \mathbf{y} de la microescala, que depende del funcional $\mathcal{F}_\mu^\sigma(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t)$ adoptado para modelar cada fase de la microestructura (Ec. (3.22)). Por conveniencia al tensor \mathbf{C} se divide en dos contribuciones aditivas: (i) la primera, simbolizada mediante \mathbf{C}_T , se denomina *Componente de Taylor* y, (ii) la segunda, identificada como $\tilde{\mathbf{C}}$, se llama *Componente Fluctuante*, véase la Ec. (3.32).

La componente de Taylor, \mathbf{C}_T , puede evaluarse a partir de la homogeneización directa de los tensores tangentes constitutivos micro \mathbf{C}_μ , sobre el dominio Ω_μ . Notar que en una microcelda con condiciones de borde tipo *Taylor* ($d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu$ (ver Sec. 3.10)), ésta es la única componente no nula en Ec. (3.32), de allí su nombre.

En este trabajo no se discutirán los detalles relacionados a la deducción del procedimiento para evaluar la componente fluctuante $\tilde{\mathbf{C}}$, sólo se presenta la metodología final para su determinación. El lector interesado en este punto específico puede consultar los aportes de De Souza Neto y Feijóo (2006) y Perić et al. (2011).

La componente $\tilde{\mathbf{C}}$ puede obtenerse a partir de la resolución de un conjunto de ecuaciones *lineales*, que permiten determinar el campo denominado *Desplazamientos fluctuantes tangenciales* $\Delta \tilde{\boldsymbol{u}}_\mu^{ij}$. Se resuelve un problema lineal por cada componente (i, j) del tensor de deformaciones macro. Considerando un sistema de referencia cartesiano, con vectores base $\{\mathbf{e}_i\}$ ($i = 1, \dots, \text{ndim}$), el conjunto de problemas

variacionales lineales a resolver puede ser enunciado de la siguiente forma:

Hallar $\Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij} \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu : \mathbf{C}_\mu : \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij} d\Omega &= \\ &= - \int_{\Omega_\mu} \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu : \mathbf{C}_\mu : \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j d\Omega \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (3.33)$$

Una vez resuelto el problema de la Ec. (3.33), se puede determinar el término $\tilde{\mathbf{C}}$ a partir de sus componentes cartesianas, como sigue:

$$\tilde{\mathbf{C}} = \left(\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (\mathbf{C}_\mu)_{klpq} (\nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij})_{pq} d\Omega \right) \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \quad (3.34)$$

donde se ha utilizado álgebra indicial para los subíndices $(i, j, k, l, p, q = 1, \dots, \text{ndim})$ ¹². Notar que los superíndices i y j en $\Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij}$ se refieren a cada una de las soluciones obtenidas a partir de la Ec. (3.33).

Finalmente, en función de lo expresado en la Ec. (3.32), el tensor constitutivo tangente homogeneizado en la macroescala, se expresa:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_T + \tilde{\mathbf{C}} \quad (3.35)$$

En el Cuadro 3.1 se resumen los ingredientes básicos que definen el Modelo Multiescala Clásico (MMCI), discutido en este capítulo.

¹²En la Ec. (3.34) se utiliza la convención que la componente (i, j, \dots) del campo vectorial (\bullet) se indican como $(\bullet)_{i,j,\dots}$.

(i) Definición de la Cinemática micro: Hipótesis N°1

$$\begin{aligned} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu &= \mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) + d\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = d\boldsymbol{\varepsilon}_R + \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s d\tilde{\mathbf{u}}_\mu & ; \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \\ \mathcal{I}_y(\bullet) &= \mathbb{I} : (\bullet) = (\bullet) & ; \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \end{aligned}$$

(ii) Admisibilidad Cinemática (Homogeneización de Deformaciones): Hipótesis N°2

$$\begin{aligned} \int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) d\Omega &= \int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu d\Omega \Rightarrow d\boldsymbol{\varepsilon}_R = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu d\Omega \\ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) \quad ; \quad \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \end{aligned}$$

- Acciones virtuales cinemáticamente admisibles:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \quad ; \quad \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \\ \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu &= \mathcal{I}_y(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R) + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R + \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu \end{aligned}$$

(iii) Admisibilidad Energética (Principio Variacional de Hill-Mandel): Hipótesis N°3

$$\boldsymbol{\sigma} : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R) d\Omega \right) = \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad ; \quad \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu)$$

(iv) Homogeneización de tensiones: Consecuencia N°1

$$d\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\sigma}_\mu d\Omega$$

(v) Problema de equilibrio en la microescala: Consecuencia N°2

Dada la historia de deformaciones regulares $\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}$ y un incremento cinemáticamente admisible $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, hallar el incremento de desplazamiento fluctuante micro $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\sigma}_\mu : \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)$$

(vi) Modelo constitutivo en la microescala:

$$\boldsymbol{\sigma}_\mu = \mathcal{F}_\mu^\sigma(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t)$$

(vii) Tensor Tangente Homogeneizado:

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}_T + \tilde{\mathbf{C}}$$

1. Componente de Taylor:

$$\mathbf{C}_T = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \mathbf{C}_\mu d\Omega_\mu$$

2. Componente fluctuante:

Hallar $\Delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij} \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu : \mathbf{C}_\mu : \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \Delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij} d\Omega = - \int_{\Omega_\mu} \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu : \mathbf{C}_\mu : \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j d\Omega \quad ; \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu)$$

$$\tilde{\mathbf{C}} = \left(\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} (\mathbf{C}_\mu)_{klpq} (\nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \Delta\tilde{\mathbf{u}}_\mu^{ij})_{pq} d\Omega \right) \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \otimes \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j$$

Cuadro 3.1: Modelo Multiescala Clásico (MMCI). Conceptos básicos e ingredientes.

Capítulo 4

Modelo multiescala para el régimen inestable del material

4.1. Preliminares

En este Capítulo se presenta el modelo multiescala propuesto para describir el comportamiento macro durante el régimen inestable material, es decir la respuesta constitutiva asociada a un punto \mathbf{x} sobre una fisura cohesiva macro (ley tracción-salto homogeneizada), ver Fig. 4.1 y Fig. 2.1. Esta técnica lleva por nombre *Modelo Multiescala Cohesivo* (MMCo) y representa el aporte original de esta tesis, en cuanto a formulación mecánica.

Para el desarrollo de esta nueva metodología multiescala se procede siguiendo el mismo formato axiomático (cinemático/variacional) discutido en el capítulo previo, explotando al máximo las ideas generales allí incorporadas. En este sentido, la esencia de la metodología propuesta se fundamenta en incorporar hipótesis relacionadas con la descripción cinemática y energética, a partir de las cuales se derivan las ecuaciones que complementan el modelo, utilizando argumentos de dualidad.

Tras la lectura de este capítulo, se podrá apreciar que la respuesta constitutiva de un punto macro arbitrario $\mathbf{x} \in \Omega$ queda completamente definida, tanto durante el régimen estable ($t < t_N$ haciendo uso del modelo MMCI presentado en el capítulo previo) como en el período inestable ($t > t_N$ haciendo uso del modelo MMCo aquí descrito). Como se mencionó anteriormente, el acoplamiento secuencial de estas dos metodologías, al tiempo t_N , define la *formulación multiescala* integral propuesta en esta tesis, denominada como *Formulación Multiescala Orientada a Falla* (FMOF).

Para todos los desarrollos aquí presentados se asumen las mismas premisas básicas en relación al modelado de la micro escala, que aquellas adoptadas en el capítulo precedente, detalladas específicamente en la Sec. 3.2.

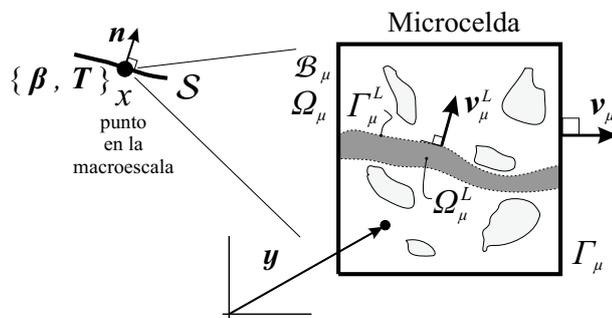


Figura 4.1: Esquema de microcelda en régimen inestable del material.

4.2. Definición Cinemática en la microescala: Hipótesis N° 1

Se centra la atención en el instante $t = t_N$ en que se satisface el criterio de nucleación en un punto \mathbf{x} , en consecuencia, se activa una fisura cohesiva \mathcal{S} sobre dicho punto macro. Para todo $t > t_N$, un incremento de deformación macro *generalizada* viene caracterizada por un incremento cinemáticamente admisible de la apertura de fisura $d\boldsymbol{\beta}$, con normal \mathbf{n} , y por un incremento/decremento de la deformación regular $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ (ver Sec. 2.3), es decir, por el conjunto de elementos $\{d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}, \mathbf{n}\}$.

En forma análoga a lo expuesto en el desarrollo del modelo multiescala clásico (MMCI), el campo de incrementos de deformación en la microescala, $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, se describe como la suma de dos contribuciones aditivas:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = \mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}) + d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (4.1)$$

siendo $d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ (Ec. 3.7) el incremento de la deformación fluctuante en la microescala y $\mathcal{I}_y^*(\bullet)$ es el *Operador de Inserción*, que en el presente contexto de modelado se define de la siguiente forma:

$$\mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}) = \mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) + \mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta}) \quad (4.2)$$

donde se observa que en realidad el operador de inserción $\mathcal{I}_y^*(\bullet)$ está compuesto por dos operadores, $\mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R)$ y $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$, uno para la componente regular y otro para la contraparte discontinua (o localizada de allí el superíndice) de la cinemática macro, respectivamente. Se recuerda que el subíndice \mathbf{y} , en los operadores, implica la posible dependencia con la posición en Ω_μ .

Utilizando los mismos argumentos físicos elaborados en la Sec. 3.3, la aplicación $\mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R)$ distribuye en forma homogénea el incremento/decremento de deformación macro regular $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ en todo el dominio Ω_μ . Por practicidad, se repite aquí su definición (ver también la Ec. 3.3):

$$\mathcal{I}_y(d\boldsymbol{\varepsilon}_R) = \mathbb{I} : d\boldsymbol{\varepsilon}_R \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \quad (4.3)$$

Desde un punto de vista cinemático, el problema ahora se reduce en definir apropiadamente el nuevo operador de inserción, $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$, estableciendo “*de qué forma*” el modo cinemático propio de una interfaz cohesiva macro se inserta en el dominio Ω_μ de la microcelda, de tal manera que este procedimiento resulte consistente con el fenómeno de falla por apertura de fisura en la macroescala.

Para intentar dar un sentido físico/mecánico a la estructura que debe adquirir $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$ considere lo siguiente. La nucleación una fisura en la macroescala surge como una *consecuencia* directa del progresivo fenómeno de localización de deformaciones, degradación y falla que se da en *regiones específicas* del dominio de la microcelda Ω_μ . Se utiliza la nomenclatura Ω_μ^L para identificar ese subdominio de Ω_μ ($\Omega_\mu^L \in \Omega$), donde la deformación, $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, localiza en la microescala (ver Figs. 4.1 y 4.2). Se requiere de un criterio específico para determinar Ω_μ^L , al tiempo t_N , el cual se discute en detalle en la Sec. 4.8.

Luego, parece natural postular que todo incremento de la cinemática macro localizada, caracterizada por los elementos $\{d\boldsymbol{\beta}, \mathbf{n}\}$, debiera estar vinculado exclusivamente al *subdominio de localización* Ω_μ^L , y no al dominio completo Ω_μ del RVE. Es decir, la idea de fondo es proponer un procedimiento de inserción localizado en Ω_μ^L y por lo tanto altamente no homogéneo, respetando la física del proceso de falla que se da a nivel micromecánico.

Para formalizar matemáticamente esta noción se debe utilizar un criterio racional que defina el mecanismo de transferencia cinemática desde la macroescala hacia la microescala, esto es postular el formato que toma el denominado *Operador de Inserción Orientado a Falla*, $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$. En este sentido se propone:

$$\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta}) = \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{1}{\alpha_\mu} \frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \quad (4.4)$$

donde cada uno de los elementos incorporados en la Ec. 4.4 se definen a continuación:

- $\phi_\mu^L(\mathbf{y})$ es una *función de colocación*, y es el término responsable de introducir la marcada no homogeneidad durante el procedimiento de inserción. La función $\phi_\mu^L(\mathbf{y})$ se define como:

$$\phi_\mu^L(\mathbf{y}) = \begin{cases} 1 & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L \\ 0 & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \setminus \Omega_\mu^L \end{cases} \quad (4.5)$$

- α_μ se denomina factor de tortuosidad¹. Este parámetro es muy importante en la definición del operador $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$ ya que garantiza una inserción consistente de la cinemática macro. Dado que la definición precisa de α_μ requiere cierta elaboración matemática, ésta se posterga hasta la Sec. 4.2.1, donde se discute detalladamente. Por el momento es suficiente considerarlo como un coeficiente constante tal que: $0 < \alpha_\mu \leq 1$.
- $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ y $\ell_\mu(\mathbf{y})$ son propiedades geométricas del dominio de localización Ω_μ^L . Para su definición considere la Fig. 4.2. Allí se observa el subdominio con localización de deformaciones micro, Ω_μ^L , representado por la zona sombreada color gris. Para interpretar correctamente $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ y $\ell_\mu(\mathbf{y})$ se construye una superficie ficticia S_μ , central al dominio Ω_μ^L , véase la línea punteada en el mismo gráfico. El campo de vectores unitarios $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ se define perpendicular a cada punto de S_μ . La longitud $\ell_\mu(\mathbf{y})$ identifica el espesor de Ω_μ^L en la dirección dada por $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$. Como caso general, $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ y $\ell_\mu(\mathbf{y})$ se asumen variables a lo largo de S_μ pero constantes en la dirección perpendicular. Fuera de Ω_μ^L , $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ y $\ell_\mu(\mathbf{y})$ no están definidos.

La interpretación mecánica de $\ell_\mu(\mathbf{y})$ es clara, representa el ancho de la banda con localización de deformaciones micro. Desde un punto de vista *físico*, $\ell_\mu(\mathbf{y})$ puede considerarse como una propiedad material o *longitud característica* material. Desde el punto de vista del *modelado*, $\ell_\mu(\mathbf{y})$ representa el espesor que se *permite* tenga la banda de falla, de acuerdo a la descripción cinemática subyacente según el tipo de modelo micro adoptado². La existencia de $\ell_\mu(\mathbf{y})$ es una presunción fundamental del esquema propuesto.

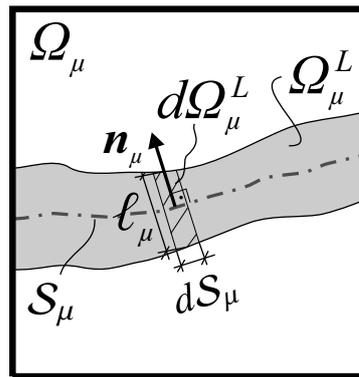


Figura 4.2: Subdominio con localización de deformaciones micro Ω_μ^L junto con sus características geométricas: S_μ , $\ell_\mu(\mathbf{y})$ y $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$.

Más allá de las formalidades mencionadas en la definición de $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$, a partir de la Ec. (4.4) puede realizarse una lectura simple. El operador $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$ toma como argumento el incremento del “vector” salto macro, $d\boldsymbol{\beta}$, y lo mapea en una magnitud micro “tipo deformación”, sólo sobre el subdominio localizado Ω_μ^L . El modo de deformación insertado, $\frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu}{\ell_\mu}$, es característico del que se produce en una banda con localización de deformaciones cuya normal es \mathbf{n}_μ y el ancho es ℓ_μ (Thomas, 1961; Hill, 1962; Rice y Rudnicki, 1980; Sánchez, 2006); de allí su utilización.

Teniendo en cuenta las Ecs. (4.1) a (4.4), se define en forma explícita el incremento de deformación micro como sigue:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu = d\boldsymbol{\varepsilon}_R + \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{1}{\alpha_\mu} \frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} + d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (4.6)$$

En vista de la definición cinemática dada por la Ec. (4.1) y considerando la Ec. (4.2), las variaciones

¹Ya que como se demuestra más adelante, considera posible tortuosidad del dominio Ω_μ^L .

²Por ejemplo en nuestra aproximación numérica basada en SCA (Smearred Crack Approach), $\ell_\mu(\mathbf{y})$ debiera corresponderse con el tamaño del elemento finito en la dirección normal a la banda de localización.

cinemáticamente admisibles de las deformaciones micro, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$, resultan:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \mathcal{I}_y^*(\mathbf{0}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \mathcal{I}_y^L(\hat{\boldsymbol{\beta}}) + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{1}{\alpha_\mu} \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (4.7)$$

donde se ha considerado que $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R \equiv \mathbf{0}$, en la microcelda correspondiente al punto $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$. Esto es así debido que, sobre la fisura macro \mathcal{S} , el esfuerzo cohesivo \mathbf{T} (que se pretende caracterizar) es una magnitud energéticamente conjugada a variaciones virtuales admisibles $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. La deformación regular “real”, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, influye en el cálculo de \mathbf{T} (Simo y Oliver, 1994; Sánchez et al., 2013) actuando simplemente como un parámetro funcional, pero no hay necesidad de considerar, en este caso, “variaciones virtuales” de la deformación macro regular $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R$.

Un aspecto a remarcar, relacionado al procedimiento de inserción propuesto, es el siguiente. Considere dos microceldas con tamaños diferentes pero cuyo espesor de localización, ℓ_μ , es el mismo (por ejemplo, típicamente el caso en que se duplica la altura del RVE de la Fig. 4.2), como es físicamente esperable durante un proceso de falla. Para un valor dado del incremento de salto macro, $d\boldsymbol{\beta}$, el operador $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$ impone la misma magnitud “tipo deformación” en la zona de falla Ω_μ^L , $\frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu}{\ell_\mu}$, en ambas microceldas. Esta particularidad es muy importante para garantizar objetividad de la respuesta cohesiva, como se verá más adelante.

4.2.1. Determinación del factor de tortuosidad: α_μ

En el Capítulo precedente (ver Sec. 3.3) se mencionó que todo operador de inserción debía satisfacer al menos dos propiedades importantes: (i) linealidad respecto a la magnitud cinemática macro sobre la cual aplica y (ii) conservación de dicha magnitud cinemática macro durante el procedimiento de inserción. El primer atributo es fácilmente verificable para el operador aquí propuesto, $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$, si se observa la Ec. (4.4)³.

Para garantizar la segunda propiedad mencionada se introduce el factor α_μ en la definición de $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$. La ecuación que se utiliza para determinar α_μ es la siguiente:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu^L|} \int_{\Omega_\mu^L} \overbrace{\phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\alpha_\mu \ell_\mu(\mathbf{y})}}^{\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})} d\Omega_\mu^L = \frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}}{\bar{\ell}_\mu} \quad \forall d\boldsymbol{\beta} \quad (4.8)$$

la cual tiene similitud conceptual con la Ec. (3.2), del Capítulo previo. Recuerde que \mathbf{n} es el vector normal unitario a la fisura macro. La Ec. (4.8) impone que, en media, la magnitud cinemática insertada a través del operador $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$ resulta equivalente a la magnitud cinemática macro $d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n} / \bar{\ell}_\mu$, la cual tiene un sentido físico asociado a la fisura macro. En la Ec. (4.8), $\bar{\ell}_\mu$ representa el espesor medio de la zona de localización micro Ω_μ^L tal que $|\Omega_\mu^L| \equiv \bar{\ell}_\mu |\mathcal{S}_\mu|$, aunque este parámetro no adquiere importancia teórica ni física en el modelo. De acuerdo a la Fig. 4.2, se incorpora la siguiente aproximación geométrica: $d\Omega_\mu^L \approx \ell_\mu(\mathbf{y}) d\mathcal{S}_\mu$. Luego, la Ec. (4.8) puede reescribirse convenientemente de la forma:

$$\frac{1}{\alpha_\mu |\mathcal{S}_\mu|} \int_{\mathcal{S}_\mu} d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) d\mathcal{S}_\mu = d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n} \quad \forall d\boldsymbol{\beta} \quad (4.9)$$

³Advierta que el operador $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$ se puede escribir como una aplicación lineal sobre $d\boldsymbol{\beta}$:

$$\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta}) = \mathbf{I}^L(\mathbf{y}) \cdot d\boldsymbol{\beta} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu$$

Para un sistema de referencia cartesiano, con vectores base $\{\mathbf{e}_i\}$ ($i = 1, \dots, \text{ndim}$), el tensor de tercer orden \mathbf{I}^L resulta:

$$\mathbf{I}^L(\mathbf{y}) = \frac{\phi_\mu^L(\mathbf{y})}{2 \alpha_\mu \ell_\mu(\mathbf{y})} [\delta_{ik} (\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}))_j + \delta_{jk} (\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}))_i] \mathbf{e}_i \otimes \mathbf{e}_j \otimes \mathbf{e}_k$$

donde $(\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}))_i$ es la componente cartesiana i de \mathbf{n}_μ y δ_{ij} es el Delta de Kronecker.

implicando necesariamente:

$$\frac{1}{\alpha_\mu |\mathcal{S}_\mu|} \int_{\mathcal{S}_\mu} \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) d\mathcal{S}_\mu = \frac{\overline{\mathbf{n}_\mu}}{\alpha_\mu} = \mathbf{n} \quad (4.10)$$

donde el vector $\overline{\mathbf{n}_\mu}$ ($\overline{\mathbf{n}_\mu} = |\mathcal{S}_\mu|^{-1} \int_{\mathcal{S}_\mu} \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) d\mathcal{S}_\mu$) se interpreta como una media de los vectores normales unitarios $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$, sobre la superficie \mathcal{S}_μ . Advierta no obstante que, en general, $\|\overline{\mathbf{n}_\mu}\| \neq 1$, siendo $\|(\bullet)\|$ la norma de un vector genérico (\bullet) . La Ec. (4.10) establece que $\overline{\mathbf{n}_\mu}$ y \mathbf{n} son colineales, pero no necesariamente de igual magnitud. Como \mathbf{n} sí es un vector unitario, surge la condición para determinar el factor α_μ , la cual se escribe como:

$$\alpha_\mu = \frac{1}{|\mathcal{S}_\mu|} \left\| \int_{\mathcal{S}_\mu} \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) d\mathcal{S}_\mu \right\| \quad (4.11)$$

En el caso particular que $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ fuese constante a lo largo de \mathcal{S}_μ , según la Ec. (4.11) se tiene: $\alpha_\mu = 1$. Por otro lado, si \mathcal{S}_μ adquiere cierta tortuosidad, es decir $\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})$ variable sobre \mathcal{S}_μ , la definición de la Ec. (4.11) implica: $0 < \alpha_\mu < 1$. De allí la denominación dada al coeficiente α_μ , como “factor de tortuosidad”.

En síntesis, la presencia de α_μ en la definición de $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$ asegura que la deformación media insertada en Ω_μ^L es equivalente al modo de deformación existente en la macroescala.

4.3. Admisibilidad Cinemática: Hipótesis N°2

Según lo discutido en la Sec. 4.2, el operador $\mathcal{I}_y^*(\bullet)$ transfiere información cinemática desde un punto \mathbf{x} de la macroescala hacia dos dominios diferentes de la microescala, Ω_μ y Ω_μ^L ; es decir, existen dos procedimientos de inserción independientes. Esto sugiere que se deben imponer dos restricciones de Admisibilidad Cinemática independientes. Se postula entonces que cualquier incremento de deformación en la microescala, $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$, es Cinemáticamente Admisible si satisface las dos restricciones siguientes⁴:

$$\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}) d\Omega = \int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu d\Omega \quad (4.12)$$

$$\int_{\Omega_\mu^L} \mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}) d\Omega = \int_{\Omega_\mu^L} d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu d\Omega \quad (4.13)$$

Reemplazando la definición de $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$ (Ec. (4.1)) en las Ecs. (4.12) y (4.13), se deducen las condiciones que debe cumplir el campo (incremental) de deformaciones micro fluctuantes $d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$:

$$\int_{\Omega_\mu} d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega = \int_{\Omega_\mu} \nabla_y \otimes^s d\tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Omega = \mathbf{0} \quad (4.14)$$

$$\int_{\Omega_\mu^L} d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega = \int_{\Omega_\mu^L} \nabla_y \otimes^s d\tilde{\mathbf{u}}_\mu d\Omega = \mathbf{0} \quad (4.15)$$

las cuales definen los dos Procedimientos de Homogeneización de Deformaciones, para el presente modelo multiscala.

Haciendo uso del teorema de Stokes Generalizado⁵, las expresiones Ecs. (4.14) y (4.15) pueden reescribirse de la forma:

$$\int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (4.16)$$

$$\int_{\Gamma_\mu^L} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \quad (4.17)$$

⁴Si se multiplica por $\frac{1}{|\Omega_\mu|}$ y $\frac{1}{|\Omega_\mu^L|}$ ambos miembros de las Ecs. (4.12) y (4.13), respectivamente, estas restricciones pueden interpretarse como una equivalencia entre la media de la deformación insertada $\mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta})$ y la media de la deformación en la microescala $d\boldsymbol{\varepsilon}_\mu$.

⁵Ver pie de página 6 de Cap. 3 (página 33).

donde Γ_μ^L representa la frontera de Ω_μ^L y \mathbf{v}_μ^L es el vector unitario normal externo a dicha frontera, ver Fig. 4.3.

La Ec. (4.16) representa la restricción cinemática *convencional*, ampliamente estudiada y analizada en el contexto de los modelos multiescala clásicos (ver MMCI, en la Sec. 3.4). Por esta razón, a lo largo de este documento se la denomina como “*Condición de Borde Estándar*” (CBE). Observe que la Ec. (4.16) define restricciones sobre la frontera Γ_μ de Ω_μ .

Por otro lado, la Ec. (4.17) representa una restricción cinemática adicional (independiente) a aplicar sobre el incremento de desplazamientos fluctuantes micro $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$. Notar que surge en forma natural a partir de las hipótesis cinemáticas incorporadas e induce nuevas condiciones de borde (*no convencionales*) sobre la frontera Γ_μ^L de Ω_μ^L . Debido a ello, tal restricción se denomina como “*Condición de Borde No Estándar*” (CBNE) y representa un aspecto ciertamente novedoso de nuestra aproximación.

Ahora se está en condiciones de introducir formalmente las definiciones de los espacios vectoriales \mathcal{U}_μ^L y \mathcal{V}_μ^L , de incrementos de desplazamientos micro fluctuantes ($d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$) y sus variaciones cinemáticamente admisibles ($\hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu$), respectivamente, los cuales son válidos durante la etapa inestable material en la macroescala ($\forall t > t_N$):

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \\ \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \mid \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Los espacios funcionales definidos en la Ec. (4.18) contienen las *restricciones cinemáticas mínimas* requeridas a nivel del RVE para garantizar el postulado de Admisibilidad Cinemática (Ecs. (4.12) y (4.13)). Por ese motivo, la metodología multiescala derivada de la Ec. (4.18) se denominará en este trabajo como submodelo cohesivo de *Mínima Restricción Cinemática*. No obstante se pueden seleccionar subespacios de $\mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu)$ y $\mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu)$ más restringidos, según las características de la microcelda que se pretende evaluar. En la Sec. 4.7 se describen algunos submodelos alternativos posibles.

En la Fig. 4.3 se comparan las *Restricciones Cinemáticas Mínimas* requeridas en el Modelo Multiescala Clásico (MMCI) y en el Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo). Resulta evidente que el MMCo es más restrictivo que el MMCI. La definición del operador $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$ juntamente con la restricción adicional ó CBNE (ver Ec. (4.17)), impone consistencia entre la magnitud cinemática macro y la que se desarrolla (en media) dentro del dominio de localización Ω_μ^L . *Este tópico es de fundamental importancia ya que determina una formulación mecánica coherente, en el sentido que la respuesta constitutiva multiescala resulta objetiva con respecto al tamaño del RVE adoptado, para caminos arbitrarios de deformaciones macro impuestas. Este atributo imprescindible de la metodología propuesta se mostrará a través de numerosos ejemplos numéricos en el Cap. 7*

La condición de borde estándar “CBE” (Ec. (3.11) ó Ec. (4.16)) se impone en el RVE desde el inicio de análisis ($\forall t \geq 0$). Por el contrario, la condición de borde no estándar “CBNE” (4.17) se introduce sólo después de verificar el criterio de nucleación de la fisura macro (es decir $\forall t > t_N$) y, como se mencionó, en forma *adicional* a las CBE existentes (véase Fig. 4.3). Observe entonces que, para un punto macro \mathbf{x} que activa una fisura cohesiva, las restricciones cinemáticas asociadas al RVE correspondiente se modifican durante el análisis mecánico. Este hecho justifica el formato incremental adoptado para el desarrollo de la aproximación propuesta, permitiendo así una transición continua de las restricciones cinemáticas sobre el problema mecánico en la microcelda.

A partir de la Ec. (4.18), es posible definir el espacio \mathcal{D}_μ^L de variaciones virtuales cinemáticamente admisibles de las deformaciones fluctuantes $\hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu$:

$$\mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu \mid \hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu = \nabla_y \otimes^s \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \wedge \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) \right\} \quad (4.19)$$

Antes de culminar esta Sección, vale la pena remarcar cuáles son las características cinemáticas

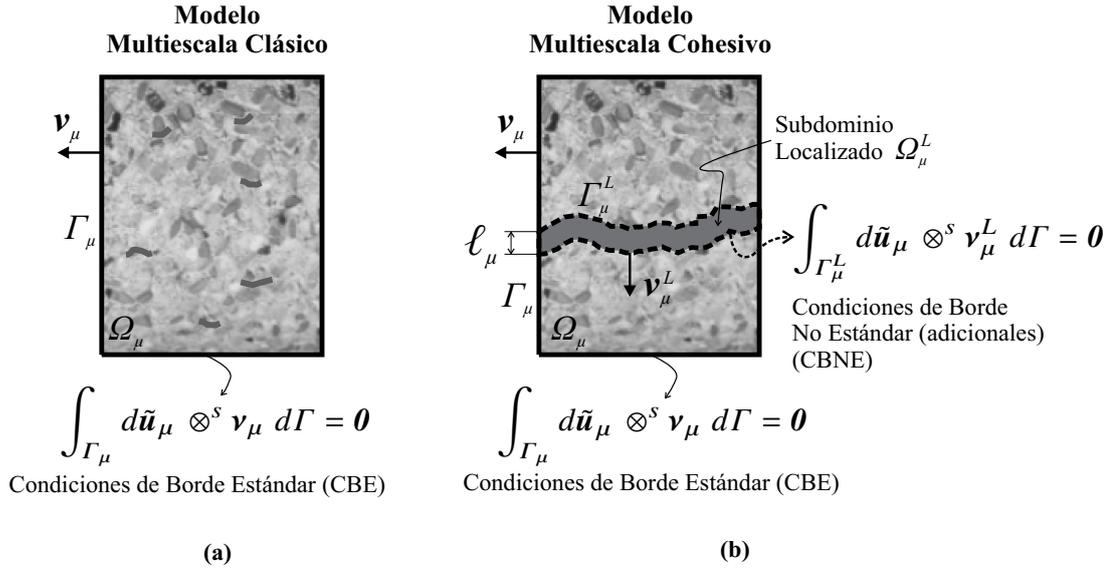


Figura 4.3: Restricciones Cinemáticas Mínimas (condiciones de borde) a imponer sobre la microcelda: (a) *Modelo Multiescala Clásico* (MMCl), (b) *Modelo Multiescala Cohesivo* (MMCo).

fundamentales de la aproximación multiescala presente (MMCo), que se diferencian sustancialmente respecto a modelos alternativos propuestos en la literatura, a saber:

- La naturaleza del operador de inserción adoptado, $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$, definido en la Ec. (4.4).
- El concepto generalizado de *Admisibilidad Cinemática* dado por las Ecs. (4.12) y (4.13).
- Las restricciones cinemáticas adicionales (CBNE) deducidas e indicadas en la Ec. (4.17).

4.4. Admisibilidad Energética: Hipótesis N°3

Con el fin de garantizar la consistencia energética entre las escalas físicas intervinientes (macro y micro), se introduce como tercer y última hipótesis del modelo el *Principio Variacional de Hill-Mandel*. Respetando la filosofía planteada en el Capítulo previo, se propone una versión generalizada de dicho principio, la cual se basa en escribir la potencia virtual interna macro poniendo en evidencia el operador de inserción $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$. De esta forma, para el régimen inestable del material macro ($t > t_N$), se puede expresar⁶:

$$\sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y^L(\hat{\beta}) d\Omega \right) = \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\varepsilon}_\mu d\Omega \quad (4.20)$$

$$\forall \hat{\beta} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}, \forall \hat{\varepsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

donde se recuerda que \mathbb{R}^{ndim} representa el espacio de vectores de dimensión “ndim”.

La Ec. (4.20) asegura una equivalencia energética entre la potencia virtual generada por la magnitud cinemática macro insertada (e integrada en todo Ω_μ) y aquella producida en la microescala.

Desarrollando la Ec. (4.20) según la estructura de $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$ (ver Ec. (4.4)) y la definición de $\hat{\varepsilon}_\mu$ (dada por Ec. (4.7)), se obtiene:

$$\sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \phi_\mu^L \frac{1}{\alpha_\mu} \frac{\hat{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right) = \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \left(\mathcal{I}_y^L(\hat{\beta}) + \hat{\varepsilon}_\mu \right) d\Omega \quad (4.21)$$

$$\forall \hat{\beta} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}, \forall \hat{\varepsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

⁶Advierta que multiplicando ambos miembros de la Ec. (4.20) por el factor $\frac{1}{|\Omega_\mu|}$, el principio de admisibilidad energética se interpreta como una equivalencia de potencias internas virtuales macro-micro en valores medios.

expresión que puede elaborarse aún más, para dar⁷:

$$\left(\overbrace{\sigma \cdot \left(\frac{1}{\alpha_\mu} \int_{S_\mu} \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) dS \right)}^A \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\int_{\Omega_\mu} \text{adj} \mathcal{I}_y^L(\sigma_\mu) d\Omega \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} + \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (4.22)$$

$$\forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

donde $\text{adj} \mathcal{I}_y^L(\bullet)$ identifica el operador adjunto de $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$. Según la Ec. (4.10), el término indicado como “A” en el lado izquierdo de la Ec. (4.22) resulta: $A = \frac{|S_\mu| \overline{\mathbf{n}_\mu}}{\alpha_\mu}$. Luego la sentencia variacional (Ec. (4.22)) se reescribe como:

$$\left(\overbrace{\sigma \cdot \frac{\overline{\mathbf{n}_\mu}}{\alpha_\mu}}^T \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} = \frac{1}{|S_\mu|} \left(\int_{\Omega_\mu} \text{adj} \mathcal{I}_y^L(\sigma_\mu) d\Omega \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} + \frac{1}{|S_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (4.23)$$

$$\forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

Dado que $(\overline{\mathbf{n}_\mu} \alpha_\mu^{-1})$ tiene norma unitaria (ver Ec. (4.10)), la magnitud T en la expresión previa tiene el significado físico de la *Tracción Cohesiva* macro, ya que ejerce potencia virtual interna sobre $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ (por unidad de superficie $|S_\mu|$). Finalmente se expresa el Principio Variacional de Hill-Mandel de la forma:

$$T \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} = \frac{1}{|S_\mu|} \left(\int_{\Omega_\mu} \text{adj} \mathcal{I}_y^L(\sigma_\mu) d\Omega \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} + \frac{1}{|S_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (4.24)$$

$$\forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

La Ec. (4.24) muestra que el dominio efectivo donde se produce potencia virtual macro es S_μ .

Al igual que en el Capítulo precedente, se argumenta que no hace falta colocar ninguna hipótesis adicional para completar la formulación del modelo MMCo. La expresión de la Ec. (4.24) contiene toda la información necesaria para derivar las ecuaciones restantes del modelo, como se discute a continuación.

4.5. Respuesta mecánica homogeneizada (T): Consecuencia N°1

La Ec. (4.24) representa una expresión que se debe satisfacer para toda variación virtual cinemáticamente admisible de las variables independientes. Asumiendo en primera instancia $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \equiv \mathbf{0}$ y que $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ adquiere valores arbitrarios, se obtiene la fórmula de homogeneización de la tracción cohesiva sobre la fisura macro S :

$$T = \frac{1}{|S_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \text{adj} \mathcal{I}_y^L(\sigma_\mu) d\Omega = \frac{1}{\alpha_\mu |S_\mu|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{\sigma_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \quad (4.25)$$

A partir de la Ec. (4.25) se advierte la incidencia directa que tiene la estructura adoptada para el operador de inserción $\mathcal{I}_y^L(\bullet)$ sobre la fórmula final obtenida para la homogeneización de tracciones. El procedimiento dado por la Ec. (4.25) no es estándar y posee características particulares, entre ellas:

- Sólo interviene la proyección $(\sigma_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}))$ del estado de tensión micromecánico completo (σ_μ) , es decir interesa una medida de la *tracción micro*.
- El proceso de homogeneización se realiza en un subdominio específico del RVE, aquel donde el campo de deformaciones micro localizan Ω_μ^L .

⁷Se ha considerado la siguiente identidad tensorial $S : (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot S \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot S \cdot \mathbf{a}$, donde S es un tensor simétrico de segundo orden.

- El factor de normalización es $|\mathcal{S}_\mu|$, en lugar de $|\Omega_\mu|$ como se daba en el MMCI.
- Interviene explícitamente el factor de tortuosidad α_μ .

Por lo expuesto se argumenta que la técnica de homogeneización de tracciones obtenida es ciertamente novedosa. Además, se enfatiza nuevamente que este procedimiento no es una definición mecánica *a-priori* del modelo, sino por el contrario, surge como una consecuencia de la cinemática micro adoptada y del Principio variacional de Hill-Mandel.

Asumiendo continuidad de tracciones en el instante $t = t_N$ ⁸, es posible obtener la fórmula de homogeneización de la tracción en forma incremental:

$$d\mathbf{T} = \frac{1}{\alpha_\mu |\mathcal{S}_\mu|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{d\boldsymbol{\sigma}_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \quad (4.26)$$

donde $d\boldsymbol{\sigma}_\mu$ se determina de acuerdo al modelo constitutivo utilizado a nivel micro (ver Ec. (3.23)).

La Ec. (4.26) brinda la respuesta constitutiva requerida para resolver el problema de equilibrio macro en un punto con comportamiento material inestable ($\mathbf{x} \in \mathcal{S}$), ver Ec. (2.17) y Cuadro 2.1.

Un aspecto interesante para comentar es el siguiente. En el Capítulo introductorio de esta tesis (Sec. 1.4.3), se introdujo una técnica fenomenológica para el modelado de falla material denominada *Aproximación por Discontinuidades Fuertes del Continuo* (ADFC) propuesta por Oliver y su grupo de colaboradores (Oliver, 2000; Oliver et al., 2002; Oliver y Huespe, 2004a,b). Como característica distintiva de esta metodología se mencionó que la ley cohesiva que regula el comportamiento de la fisura macro no se impone como un modelo constitutivo *adicional* sino que se deduce a partir del mismo modelo de continuo (tensión-deformación) utilizado para el material no fracturado. Aunque el modelo multiescala propuesto en esta tesis para caracterizar el comportamiento de una fisura macro (MMCo) está formulado a partir de principios mecánicos muy diferentes respecto al método ADFC, comparte con este último esa característica peculiar. Si se observa la expresión de homogeneización de tracciones aquí propuesta (Ec. (4.25)), se tiene que: *la tracción cohesiva deriva a partir de la homogeneización de campos tensionales micro obtenidos mediante leyes constitutivas del continuo, es decir sólo hacen falta definir leyes fenomenológicas convencionales de tipo tensión-deformación, a nivel micro*. En cierto modo el modelo MMCo aporta una fundamentación desde una perspectiva de modelado multiescala en relación a uno de los preceptos básicos sobre el cual se fundamenta la ADFC.

4.6. Problema de equilibrio en la microescala: Consecuencia N°2

Alternativamente, considerando ahora $\hat{\boldsymbol{\beta}} \equiv \mathbf{0}$ y variaciones virtuales cinemáticamente admisibles $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$, el principio de Hill-Mandel (ver la Ec. (4.24)) establece:

$$\int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu) \quad (4.27)$$

La expresión variacional previa representa el equilibrio mecánico en la microescala durante el régimen inestable material. El mismo resulta análogo al deducido para la etapa estable (ver modelo MMCI). La única diferencia viene dada a través de los espacios funcionales cinemáticamente admisibles sobre los cuales están planteados cada uno de estos problemas (condiciones de borde). Considerando las Ecs. (3.7)

⁸La continuidad de las tracciones \mathbf{T} , en el instante $t = t_N$, se verifica si:

$$\mathbf{T}_{\Omega_\mu}^{t_N} = \mathbf{T}_{\Omega_\mu^L}^{t_N}$$

donde $\mathbf{T}_{\Omega_\mu}^{t_N} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n}$ con $\boldsymbol{\sigma}$ evaluado en el instante t_N mediante la regla de homogeneización dada por la Ec. (3.17), mientras que $\mathbf{T}_{\Omega_\mu^L}^{t_N}$ se obtiene con Ec. (4.25), evaluada en el mismo instante. No existe una demostración rigurosa de la igualdad previa. No obstante, en todas las experiencias numéricas realizadas se corroboró la validez de esta suposición.

y (4.18) y el formato incremental adoptado en este trabajo, el problema micromecánico puede enunciarse en forma equivalente como sigue⁹:

Dada la historia de deformaciones generalizadas ($\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^{t-dt}$, $\{\boldsymbol{\beta}\}^{t-dt}$) e incrementos cinemáticamente admisibles ($d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, $d\boldsymbol{\beta}$), hallar el incremento de desplazamiento fluctuante micro $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} d\boldsymbol{\sigma}_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_R\}^t) : \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) \quad (4.28)$$

La Ec. (4.28) implica que el incremento de las tensiones micro, $d\boldsymbol{\sigma}_\mu$, se encuentra autoequilibrado, representando las reacciones al sistema de carga generalizado inducido por el procedimiento de inserción $\mathcal{I}_{\mathbf{y}}(d\boldsymbol{\varepsilon}_R)$ y $\mathcal{I}_{\mathbf{y}}^L(d\boldsymbol{\beta})$, en el dominio completo de la microcelda (Ω_μ) y en el subdominio localizado (Ω_μ^L), respectivamente.

La formulación propuesta permite partir de una microcelda con restricciones cinemáticas convencionales (CBE), definida para el régimen estable del punto \mathbf{x} y, en forma natural, derivar en una microcelda con restricciones adicionales (CBNE), utilizada para caracterizar la parte inestable del mismo punto.

Por conveniencia, en el Cuadro 4.1 se resumen los ingredientes básicos que definen el Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo), discutido en este capítulo.

4.7. Submodelos del MMCo: diferentes condiciones de borde

Según la discusión elaborada en la Sec. 4.3 el modelo MMCo exige la imposición de dos tipos de restricciones cinemáticas simultáneas sobre el campo primal $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$: (i) la Condición de Borde Estándar (CBE) sobre Γ_μ y (ii) la Condición de Borde No Estándar (CBNE) sobre Γ_μ^L . Las Ecs. (4.16) y (4.17), o bien los espacios funcionales $\{\mathcal{U}_\mu^L, \mathcal{V}_\mu^L\}$, definidos en la Ec. (4.18), caracterizan el modelo MMCo con *Restricción Cinemática Mínima*. No obstante, es posible seleccionar subespacios de $\{\mathcal{U}_\mu^L, \mathcal{V}_\mu^L\}$ más restringidos cinemáticamente y por ende más rígidos, dando origen así a diferentes submodelos multiescalas.

En particular, observe que ahora es posible pensar en distintas opciones sobre cada una de las restricciones: CBE ó CBNE. En la Sec. 3.10 del Capítulo precedente, se presentaron las alternativas más usuales en relación a las CBE, sobre Γ_μ , como por ejemplo los submodelos de *Taylor*, *Lineal* y *Periódico*. Utilizando argumentos análogos a los expuestos en dicha Sección se puede plantear, para el caso de las CBNE, lo siguiente:

a) CBNE tipo *Taylor*:

$$d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L \quad (4.29)$$

b) CBNE tipo *Lineal*:

$$d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu^L \quad (4.30)$$

c) CBNE tipo *Periódica*: Este tipo de restricción cinemática no tiene demasiado sentido físico en el contexto de análisis presente dado que, en general, el dominio con localización de deformaciones Ω_μ^L adquiere una topología arbitraria, dificultando así postular condiciones periódicas en $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ sobre Γ_μ^L .

⁹Se asume aquí que el problema de equilibrio micro se satisface para el paso de tiempo previo, ($t - dt$), es decir: $\int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu^{t-dt} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega = 0$, $\forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu$

(i) Definición de la Cinemática micro: Hipótesis N°1

$$d\varepsilon_\mu = \overbrace{\mathcal{I}_y^*(d\varepsilon_R, d\beta)} + d\tilde{\varepsilon}_\mu = d\varepsilon_R + \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{d\beta \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\alpha_\mu \ell_\mu(\mathbf{y})} + d\tilde{\varepsilon}_\mu \quad ; \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu$$

$$\phi_\mu^L(\mathbf{y}) = \begin{cases} 1 & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L \\ 0 & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \setminus \Omega_\mu^L \end{cases}$$

(ii) Admisibilidad Cinemática (Homogeneización de Deformaciones): Hipótesis N°2

$$\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y^*(d\varepsilon_R, d\beta) d\Omega = \int_{\Omega_\mu} d\varepsilon_\mu d\Omega \Rightarrow d\varepsilon_R + d\beta \otimes^s \frac{1}{|\Omega_\mu^L|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\alpha_\mu \ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} d\varepsilon_\mu d\Omega$$

$$\int_{\Omega_\mu^L} \mathcal{I}_y^*(d\varepsilon_R, d\beta) d\Omega = \int_{\Omega_\mu^L} d\varepsilon_\mu d\Omega \Rightarrow d\varepsilon_R + d\beta \otimes^s \frac{1}{|\Omega_\mu^L|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\alpha_\mu \ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega = \frac{1}{|\Omega_\mu^L|} \int_{\Omega_\mu^L} d\varepsilon_\mu d\Omega$$

$$d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu) ; \quad \mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu) = \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\}$$

- Acciones virtuales cinemáticamente admisibles:

$$\hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) ; \quad \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\}$$

$$\hat{\varepsilon}_\mu = \mathcal{I}_y^L(\hat{\beta}) + \hat{\varepsilon}_\mu = \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{\hat{\beta} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\alpha_\mu \ell_\mu(\mathbf{y})} + \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu$$

(iii) Admisibilidad Energética (Principio Variacional de Hill-Mandel): Hipótesis N°3

$$\sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y^L(\hat{\beta}) d\Omega \right) = \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\varepsilon}_\mu d\Omega \quad ; \quad \forall \hat{\beta} \in \mathbb{R}^{\text{ndim}}, \forall \hat{\varepsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

(iv) Homogeneización de tracciones: Consecuencia N°1

$$dT = \frac{1}{\alpha_\mu |\mathcal{S}_\mu|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{d\sigma_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega$$

(v) Problema de equilibrio en la microescala: Consecuencia N°2

Dada la historia de deformaciones generalizadas ($\{\varepsilon_R\}^{t-dt}$, $\{\beta\}^{t-dt}$) e incrementos cinemáticamente admisibles ($d\varepsilon_R, d\beta$), hallar el incremento de desplazamiento fluctuante micro $d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} d\sigma_\mu : \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\mathbf{u}}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu)$$

(vi) Modelo constitutivo en la microescala:

$$\sigma_\mu = \mathcal{F}_\mu^\sigma(\{\varepsilon_\mu\}^t)$$

Cuadro 4.1: Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo). Conceptos básicos e ingredientes.

d) CBNE tipo *Mínima Restricción* (ya expuesta anteriormente en la Ec. (4.17))

$$\int_{\Gamma_\mu^L} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \quad (4.31)$$

Combinando las opciones relacionadas a las CBE y a las CBNE, es posible postular diferentes submodelos de la metodología multiescala cohesiva propuesta. Con el único propósito de ilustrar algunas de estas opciones, a continuación se propone:

■ Ejemplo N°1: CBE-*Mínima Restricción*, CBNE-*Taylor*:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\mu \text{Ej1}}^L(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L \right\} \subseteq \mathcal{U}_\mu^L \\ \mathcal{V}_{\mu \text{Ej1}}^L(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L \right\} \subseteq \mathcal{V}_\mu^L \end{aligned} \quad (4.32)$$

■ Ejemplo N°2: CBE-*Mínima Restricción*, CBNE-*Lineal*:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\mu \text{Ej2}}^L(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu^L \right\} \subseteq \mathcal{U}_\mu^L \\ \mathcal{V}_{\mu \text{Ej2}}^L(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \mathbf{0} \quad \forall \mathbf{y} \in \Gamma_\mu^L \right\} \subseteq \mathcal{V}_\mu^L \end{aligned} \quad (4.33)$$

■ Ejemplo N°3: CBE-*Periódica Clásica*, CBNE-*Mínima Restricción*:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_{\mu \text{Ej3}}^L(\Omega_\mu) &= \left\{ d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \mid d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = d\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} d\tilde{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \subseteq \mathcal{U}_\mu^L \\ \mathcal{V}_{\mu \text{Ej3}}^L(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\mathbf{u}}_\mu \mid \hat{\mathbf{u}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^+) = \hat{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) \quad \forall \text{par } \{\mathbf{y}^+, \mathbf{y}^-\} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} \hat{\mathbf{u}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \subseteq \mathcal{V}_\mu^L \end{aligned} \quad (4.34)$$

4.8. Identificación del dominio localización Ω_μ^L en la microcelda

Un ingrediente importante de la formulación multiescala propuesta es la identificación correcta del subdominio con localización de deformaciones Ω_μ^L . La relevancia de este tópico se debe a que:

- Una vez nucleada la fisura cohesiva, los incrementos del salto macro $d\boldsymbol{\beta}$ se aplican, exclusivamente, en el subdominio Ω_μ^L (véase la definición del operador de inserción $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$ en la Ec. (4.4)).
- Es necesario imponer nuevas restricciones cinemáticas, aquí denominadas CBNE, sobre la frontera Γ_μ^L de Ω_μ^L .

La idea que se propone aquí es muy simple. Según el criterio de nucleación explicado en la Sec. 2.5, al detectar bifurcación material se conoce la solución $\mathbb{S}_N = \{t_N, \mathbf{n}, d\boldsymbol{\gamma}\}$ admisible con el estado homogeneizado de la microcelda que induce inestabilidad a nivel macro, donde t_N es el instante de nucleación, \mathbf{n} es el vector unitario normal a la fisura macro y $d\boldsymbol{\gamma}$ representa un vector que da la dirección inicial de apertura de fisura. En estas condiciones mecánicas específicas, las componentes de deformación micro que tienden a localizar en el dominio Ω_μ del RVE en estudio tienen, precisamente, una estructura de tipo $(d\boldsymbol{\gamma} \otimes^s \mathbf{n})$. Luego todos los puntos \mathbf{y} de la microcelda cuyo incremento de deformación micro fluctuante, $d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$, tenga proyección positiva sobre la dirección dada por $(d\boldsymbol{\gamma} \otimes^s \mathbf{n})$ deberá formar parte del subdominio localizado Ω_μ^L . Matemáticamente se puede expresar el criterio para identificar Ω_μ^L como sigue:

$$\Omega_\mu^L = \{ \mathbf{y} \in \Omega_\mu \mid d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu(\mathbf{y}) : (d\boldsymbol{\gamma} \otimes^s \mathbf{n}) > 0 \text{ para } t = t_N \} \quad (4.35)$$

donde todas las variables en la Ec. (4.35) se obtienen mediante el multiescala clásico (MMCI, ver Cap. 3).

El método descrito permite capturar subdominios con localización de deformaciones simples o intrincados, incluyendo posible tortuosidad o múltiples zonas de localización. La complejidad de Ω_μ^L dependerá de la microestructura subyacente (distribución geométrica de las heterogeneidades, materiales constituyentes, etc.) y de la historia de carga.

Un aspecto importante de la metodología propuesta es que ésta se basa exclusivamente en un criterio cinemático y, por ende, es independiente del comportamiento constitutivo que caracteriza cada punto $\mathbf{y} \in \Omega_\mu$. Desde un punto de vista físico, el material en Ω_μ^L sigue un camino de carga con degradación de tensiones pero entendido en un “sentido promedio”, esto no significa que cada punto $\mathbf{y} \in \Omega_\mu^L$ sufra un decremento de su estado tensional.

El uso de este concepto cinemático (Ec. (4.35)) cubre un gran cantidad de situaciones, como las ilustradas en la Fig. 4.4 (las zonas indicadas con color gris oscuro representan los subdominios Ω_μ^L capturados). Allí se ha definido la siguiente nomenclatura: Ω_μ^{Ls} , porción del subdominio constituido por material en régimen de ablandamiento (*softening*, de allí el superíndice); Ω_μ^{Le} , porción de subdominio constituido por material elástico débil y Ω_μ^{Lv} , porción de subdominio constituido por vacíos.

El ejemplo más simple de interpretar es aquel esquematizado en la Fig. 4.4-a, donde todos los puntos $\mathbf{y} \in \Omega_\mu^L$ experimentan ablandamiento material, luego se tiene $\Omega_\mu^L = \Omega_\mu^{Ls}$.

Otro posible escenario es el que se muestra en la Fig. 4.4-b. Observe que el criterio dado por la Ec. (4.35) incluye una porción de material con ablandamiento (Ω_μ^{Ls}) y una pequeña zona de material elástico (suficiente flexible) Ω_μ^{Le} . En media, el comportamiento homogeneizado del material degrada su estado tensional. En este caso se tiene: $\Omega_\mu^L = \Omega_\mu^{Ls} \cup \Omega_\mu^{Le}$.

Un tercer ejemplo es el indicado en la Fig. 4.4-c, donde la banda de localización cruza un poro. El poro (vacío) puede idealizarse como el caso límite de un material elástico, cuyo módulo de elasticidad tiende a cero. El subdominio de localización, consistente con la metodología propuesta en la Ec. (4.35), resulta en: $\Omega_\mu^L = \Omega_\mu^{Ls} \cup \Omega_\mu^{Lv}$.

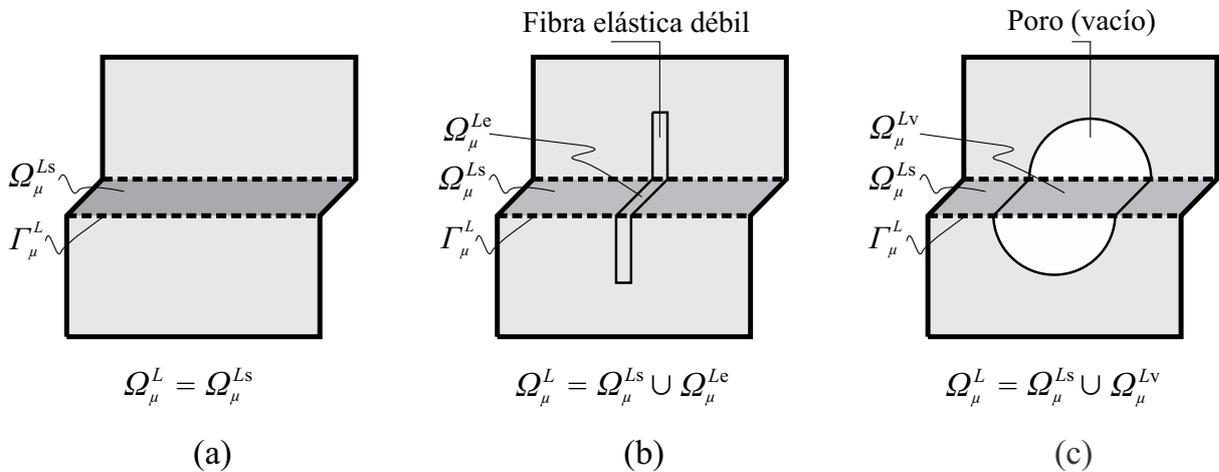


Figura 4.4: Subdominio de localización Ω_μ^L para diferentes tipos de microestructuras heterogéneas: (a) Zona compuesta completamente de material con ablandamiento, (b) Zona compuesta de material con ablandamiento y una pequeña zona de un material elástico (suficientemente flexible), (c) Zona compuesta de material con ablandamiento y parte de un poro.

Parte III

Implementación Numérica

A partir de los desarrollos teóricos abordados en la Parte [II](#) de la tesis y teniendo en cuenta las características particulares del modelo en estudio, la implementación computacional de la formulación multiescala propuesta distingue claramente dos esquemas numéricos disímiles, uno para cada escala de análisis, basados ambos en el Método de los Elementos Finitos, a saber:

- *Macroescala*: se utiliza una técnica de elementos finitos con discontinuidades fuertes embebidas de soporte local ([Oliver et al., 2006](#); [Sánchez et al., 2006](#); [Linder y Armero, 2007](#)), para modelar el fenómeno de nucleación y propagación de fisuras cohesivas en la macroestructura.
- *Microescala*: se adopta la aproximación de fisura distribuida (Smearred-Crack Approach [Rots et al. \(1985\)](#); [Rots \(1988\)](#); [Oliver \(1989\)](#)) para modelar micro degradación y falla material, la cual está basada en tecnología estándar de elementos finitos. Se incorpora además, como tópico peculiar en lo referente al modelo numérico micro, un conjunto de restricciones cinemáticas específicas (condiciones de borde) inherentes a la formulación mutiescala desarrollada.

Cabe mencionar en este punto que, desde una perspectiva global, el paradigma numérico básico puede idealizarse simplemente como dos esquemas de elementos finitos anidados, acoplados en ambas direcciones (macro-micro). De allí el acrónimo comúnmente encontrado en la literatura para este tipo de aproximaciones: FE² ([Feyel y Chaboche, 2000](#); [Feyel, 2003](#)).

El propósito de esta parte del trabajo consiste en lograr un intercambio de información coherente, tanto desde el punto de vista cinemático como energético, entre las aproximaciones numéricas adoptadas para cada escala de análisis.

En la Parte [III](#) del presente documento, que abarca los próximos dos Capítulos ([5](#) y [6](#)), se describen al detalle ambas formulaciones numéricas (macro y micro), junto con los algoritmos propuestos. En especial, los desarrollos del Cap. [6](#) representan uno de los principales aportes *numéricos* de la tesis. Allí se discute un procedimiento generalizado para imponer restricciones cinemáticas en un entorno multiescala, el cual permite en forma muy simple y flexible generar diferentes submodelos como también modificar las condiciones de borde durante el cálculo. Este último hecho representa un tópico de especial importancia para el modelado de la falla material.

Solamente aquellos ítems numéricos “*no convencionales*”, respecto a un esquema estándar de Elementos Finitos, serán abordados en esta parte de la tesis. Los aspectos tradicionales del método se asumen como conocidos por el lector.

Sin pérdida de generalidad, todos los desarrollos siguientes se restringen a geometrías bidimensionales.

Capítulo 5

Implementación Numérica del Modelo Macro

De acuerdo a la formulación multiescala propuesta, el fenómeno de falla a nivel macro se materializa a partir de la nucleación y posterior propagación/evolución de fisuras cohesivas. De este modo, el modelo mecánico en la macroescala requiere de una cinemática singular que considere discontinuidades en las variables principales. Este capítulo describe una aproximación numérica adecuada para describir tal proceso de falla.

También en este capítulo se explica en forma detallada cuál es el procedimiento propuesto para realizar el salto de escala a nivel del modelo numérico, esto es a nivel de los puntos de integración en cada elemento finito de la macro-escala.

5.1. Descripción cinemática

Se adopta una técnica de elementos finitos con discontinuidades fuertes embebidas, similar a la estrategia propuesta en [Oliver y Huespe \(2004a\)](#), comúnmente reconocida bajo el acrónimo de formulación E-FEM (*Embedded Finite Element Method*, ver por ejemplo las contribuciones de [Oliver et al. \(2006\)](#); [Jirásek \(2000\)](#); [Sancho et al. \(2007\)](#); [Sánchez et al. \(2006\)](#); [Linder y Armero \(2007\)](#), entre muchas otras que utilizan metodologías similares). Este procedimiento introduce modos adicionales de desplazamientos ideados para capturar las discontinuidades propias del mecanismo de apertura de una fisura. Sin pérdida de generalidad, se utiliza un elemento finito triangular de deformación constante en estado plano (CST), como tecnología subyacente sobre la cual se incorpora el enriquecimiento cinemático dado por los saltos en desplazamientos. Esta técnica numérica es clásica en la actualidad y muy aceptada en la comunidad científica.

A partir de este punto y en lo que resta del documento se asume que todas las variables tienen implícitamente asociado el atributo de variables discretas, es decir variables relacionadas con el modelo numérico. Advierta que no se introducirá nomenclatura adicional para diferenciarlas de las variables análogas definidas a nivel del continuo.

Considere el cuerpo \mathcal{B} identificado con el dominio Ω , a nivel macro, discretizado mediante una triangulación de elementos finitos Ω^e , esto es $\Omega = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega^e$, donde n_{el} es el número total de elementos de la malla. Se utiliza el superíndice “ e ” para denotar objetos asociados a un elemento finito genérico. Se adopta un sistema de referencia cartesiano ($\{\mathbf{e}_i\}$) que asocia a todo punto $\mathbf{x} \in \Omega$ el correspondiente vector de coordenadas $\mathbf{x} = x_i \mathbf{e}_i$, $i = 1, \dots, \text{ndim}$, donde cada \mathbf{e}_i representa un versor base del sistema considerado y x_i las componentes cartesianas correspondientes.

Inicialmente, la cinemática de Ω es continua (clásica) sin embargo, debido a fenómenos de degradación que toman lugar a nivel micromecánico, es admisible la nucleación de una fisura cohesiva a nivel macroestructural, en algún instante durante el proceso de carga. El problema entonces posee una superficie de discontinuidad en desplazamientos, \mathcal{S} , denotando la existencia de dicha fisura cohesiva.

Una característica geométrica importante de \mathcal{S} viene dada por el vector normal unitario \mathbf{n} , definido para cada punto $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$, el cual puede ser espacialmente variable.

Se requiere de un criterio específico para detectar el instante de activación de la fisura cohesiva (denominado tiempo de nucleación $t_N \in [0, t_F]$) como también para determinar su orientación espacial (\mathbf{n}). Este criterio es aquel discutido previamente en la Sec. 2.5 a nivel teórico y que se detalla más adelante, en la Sec. 5.4 de este Capítulo, a nivel del modelo numérico¹.

La superficie \mathcal{S} divide a Ω en dos sub-dominios disjuntos Ω_+ y Ω_- (\mathbf{n} apuntando hacia Ω_+), tal como se muestra en la Fig. 5.1-b. En este contexto, la interpolación del campo de desplazamiento puede escribirse convenientemente de la forma (Simo y Oliver, 1994):

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \underbrace{\sum_{i=1}^{n_{\text{nod}}} N_i(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{u}}_i}_{\text{término continuo}} + \underbrace{\sum_{e=1}^{n_{\text{el}}^{\mathcal{S}}} (\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^e(\mathbf{x}) - N_+^e(\mathbf{x})) \boldsymbol{\beta}^e}_{\text{término discontinuo}} \quad (5.1)$$

donde n_{nod} simboliza el número total de nodos de la malla de elementos finitos mientras que $N_i(\mathbf{x})$ y $\bar{\mathbf{u}}_i$ representan, respectivamente, la función de forma y la componente continua (regular) del vector de desplazamiento, ambas variables asociadas al nodo “ i ” (de allí el sub-índice). En la Ec. (5.1) se considera además que: $n_{\text{el}}^{\mathcal{S}}$ es el número total de elementos atravesados por la superficie de discontinuidad \mathcal{S} , $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^e$ es la función escalón (Heaviside) del elemento “ e ” colocada sobre \mathcal{S} (esto es $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^e(\mathbf{x}) = 1$ si $\mathbf{x} \in \Omega_+$, $\mathcal{H}_{\mathcal{S}}^e(\mathbf{x}) = 0$ de otra forma), $N_+^e(\mathbf{x})$ denota la función de forma relacionada al nodo ubicado en la parte Ω_+ del elemento y $\boldsymbol{\beta}^e$ es el vector salto de desplazamiento del mismo elemento (ver Sec. 2.3).

En la Ec. (5.1) se aprecia además la definición de la función $\mathcal{M}_{\mathcal{S}}^e = \mathcal{H}_{\mathcal{S}}^e(\mathbf{x}) - N_+^e(\mathbf{x})$, denominada función salto unitario. Al considerar triángulos lineales (CST), esta función de forma enriquecida luce como se observa en la Fig. 5.1-a, para un elemento finito genérico “ e ”.

El grado de libertad adicional introducido en la formulación, relacionado con la apertura de fisura $\boldsymbol{\beta}^e$, se asume constante en el interior de cada elemento finito, posibilitando así su posterior condensación. Esto implica que el campo salto de desplazamiento no posee continuidad entre elementos finitos adyacentes, una característica propia de la técnica E-FEM adoptada². Según lo anterior, se tiene trivialmente que: $\nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \boldsymbol{\beta}^e = \mathbf{0}$.

Considere un elemento genérico “ e ” intersecado por la superficie de discontinuidad. Localmente, definimos \mathcal{S}^e como la interfaz cohesiva macro asociada al elemento finito en estudio ($\mathcal{S}^e = \Omega^e \cap \mathcal{S}$). La componente regular (acotada) de la deformación $\boldsymbol{\varepsilon}_R^e$ para el elemento finito “ e ”, véase además la Ec. (2.3) del Cap. 2, se interpola de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_R^e(\mathbf{x}) = \mathbf{B}^e(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{u}}^e - [\nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s N_+^e(\mathbf{x})] \boldsymbol{\beta}^e \quad ; \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega^e \setminus \mathcal{S}^e \quad (5.2)$$

siendo $\mathbf{B}^e(\mathbf{x})$ la clásica matriz que relaciona deformaciones y desplazamientos para pequeñas deformaciones. Utilizando notación de Voigt para tensores en \mathbb{R}^2 y considerando un sistema de referencia cartesiano definido por la base $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2\}$, $\mathbf{B}^e(\mathbf{x})$ puede escribirse:

$$\mathbf{B}^e(\mathbf{x}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^e}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N_2^e}{\partial x_1} & 0 & \frac{\partial N_3^e}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_1^e}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N_2^e}{\partial x_2} & 0 & \frac{\partial N_3^e}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N_1^e}{\partial x_2} & \frac{\partial N_1^e}{\partial x_1} & \frac{\partial N_2^e}{\partial x_2} & \frac{\partial N_2^e}{\partial x_1} & \frac{\partial N_3^e}{\partial x_2} & \frac{\partial N_3^e}{\partial x_1} \end{bmatrix} \quad (5.3)$$

¹Las aproximaciones de elementos finitos con saltos de desplazamientos embebidos a menudo requieren también la implementación de esquemas numéricos adicionales de trazado de discontinuidades en la malla discreta, comúnmente denominados algoritmos de *Tracking*, ver por ejemplo: Belytschko et al. (2001); Feist y Hofstetter (2004); Mosler y Meschke (2003); Oliver y Huespe (2004a); Oliver et al. (2014); Dias (2012). Cualquiera de las técnicas referenciadas pueden ser utilizadas en el contexto presente.

²Otra alternativa viable es la utilización elementos finitos de tipo X-FEM ó eXtended Finite Element Method (Belytschko et al. 2001, 2003; Mariani y Perego, 2003; Moës et al. September 11-14, 2000), donde los modos adicionales discontinuos se incorporan como grados de libertad *generalizados* a los nodos de la malla. La formulación multiescala propuesta en esta tesis es aplicable a cualquier tecnología de elementos finitos con discontinuidades embebidas, sean de soporte local (E-FEM) o global (X-FEM).

donde los sub-índices $\{1, 2, 3\}$ en la función de forma N^e denotan el número (local) de nodo perteneciente al elemento “ e ” mientras que $\{\partial(\bullet)/\partial x_1, \partial(\bullet)/\partial x_2\}$ simbolizan las derivadas parciales respecto a las coordenadas cartesianas $\{x_1, x_2\}$, respectivamente. Siguiendo con el mismo estilo de notación, el vector $\bar{\mathbf{u}}^e$, que simboliza los desplazamientos regulares nodales del elemento, se expresa como:

$$\bar{\mathbf{u}}^e = \begin{bmatrix} \bar{u}_{1x_1}^e \\ \bar{u}_{1x_2}^e \\ \bar{u}_{2x_1}^e \\ \bar{u}_{2x_2}^e \\ \bar{u}_{3x_1}^e \\ \bar{u}_{3x_2}^e \end{bmatrix} \quad (5.4)$$

Por otro lado, en la Ec. (5.2), el operador $\nabla_x^s N_+^e$ y el vector salto de desplazamiento elemental, β^e , adquieren la forma:

$$\nabla_x \otimes^s N_+^e = \begin{bmatrix} \frac{\partial N_+^e}{\partial x_1} & 0 \\ 0 & \frac{\partial N_+^e}{\partial x_2} \\ \frac{\partial N_+^e}{\partial x_2} & \frac{\partial N_+^e}{\partial x_1} \end{bmatrix} \quad (5.5)$$

$$\beta^e = \begin{bmatrix} \beta_{x_1}^e \\ \beta_{x_2}^e \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

5.2. Equilibrio

Reemplazando las expresiones de desplazamientos y deformaciones interpoladas, véase Ecs. (5.1) y (5.2), en el problema de equilibrio incremental macro, definido por la Ec. (2.11) del Cap. 2, y realizando variaciones respecto a los vectores globales $\bar{\mathbf{u}}$ y β (advierta que los vectores globales $\bar{\mathbf{u}}$ y β tienen en cuenta la contribución de cada vector elemental $\bar{\mathbf{u}}^e$ y β^e , respectivamente) es posible derivar las dos ecuaciones discretas de equilibrio incremental que se indican a continuación:

$$\bigwedge_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega^e \setminus S^e} (\mathbf{B}^e)^T d\sigma^e d\Omega^e - \bigwedge_{e=1}^{n_{el}} (d\mathbf{F}^e)^{ext} = \mathbf{0} \quad (5.7)$$

$$- \int_{\Omega^e \setminus S^e} [\nabla_x \otimes^s N_+^e]^T d\sigma^e d\Omega^e + \int_{S^e} d\mathbf{T}^e dS^e = \mathbf{0} \quad (5.8)$$

donde $\bigwedge_{e=1}^{n_{el}}$ representa el operador de ensamble estándar que colecta los aportes de todos los elementos finitos, desde $e = 1$ hasta $e = n_{el}$, de la malla adoptada. El término $(d\mathbf{F}^e)^{ext}$, en la Ec. (5.7), denota el clásico vector de fuerzas externas equivalentes incrementales del elemento “ e ”.

Notar que existen n_{el}^S ecuaciones del tipo (5.8), es decir una por cada elemento intersectado por la interfaz de discontinuidad S . Debido al tipo de interpolación adoptada para los saltos de desplazamientos β (discontinuo entre elementos), estas ecuaciones pueden condensarse estáticamente y no forman parte del sistema final de ecuaciones. A pesar de ello se prefiere proseguir con la descripción de la formulación llevando en cuenta todos los grados de libertad del modelo numérico, dado que el procedimiento de condensación es un aspecto clásico del MEF y para los fines de este trabajo no merece ser descripto.

Reemplazando la ecuación de equilibrio integral (5.8) por una expresión de colocación puntual (por elemento), es posible derivar una formulación alternativa (no-simétrica), caracterizada por imponer una condición de equilibrio fuerte entre la fuerza cohesiva actuante entre los labios de la fisura, \mathbf{T}^e , y su entorno (ver Oliver et al., 2005):

$$- d\sigma^e \mathbf{n}^e + d\mathbf{T}^e = \mathbf{0} \quad (5.9)$$

donde $d\sigma^e$ se evalúa en un punto representativo del dominio $\Omega^e \setminus \mathcal{S}^e$ y dT^e en uno representativo de \mathcal{S}^e mientras que \mathbf{n}^e denota el vector unitario normal a la interfaz cohesiva \mathcal{S}^e del elemento “e”, ver Fig. 5.1. La aproximación propuesta en esta tesis se basa en la resolución de la ecuación de equilibrio (5.7) para la parte regular (continua) del sólido y la ecuación (5.9) para el equilibrio a través de \mathcal{S} , es decir se adopta un esquema no-simétrico estática y cinemáticamente óptimo, denominado con la sigla “SKON” según la clasificación propuesta en Jirásek (2000).

Luego del procedimiento de ensamble aplicado a la Ec. (5.7) y considerando además el conjunto de ecuaciones (5.9), pueden obtenerse las variables primales $\{\bar{\mathbf{u}}, \beta\}$ que definen el problema macro, tras resolver el siguiente sistema no lineal de ecuaciones:

$$\mathcal{R}(\bar{\mathbf{u}}, \beta) = \begin{bmatrix} \mathcal{R}_{\bar{\mathbf{u}}} \\ \mathcal{R}_{\beta} \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (5.10)$$

donde $\mathcal{R}_{\bar{\mathbf{u}}}$ y \mathcal{R}_{β} representan los residuos asociados a los desplazamientos regulares y saltos respectivamente.

5.3. Integración numérica. Técnica de salto de escala computacional

La integración numérica del conjunto de ecuaciones de equilibrio de las Ecs. (5.7) y (5.9) se realiza incorporando dos puntos de cuadratura identificados como PGR (Punto de Gauss Regular) y PGL (Punto de Gauss Localizado). En la Fig. 5.1-b se observa un croquis esquemático del procedimiento utilizado.

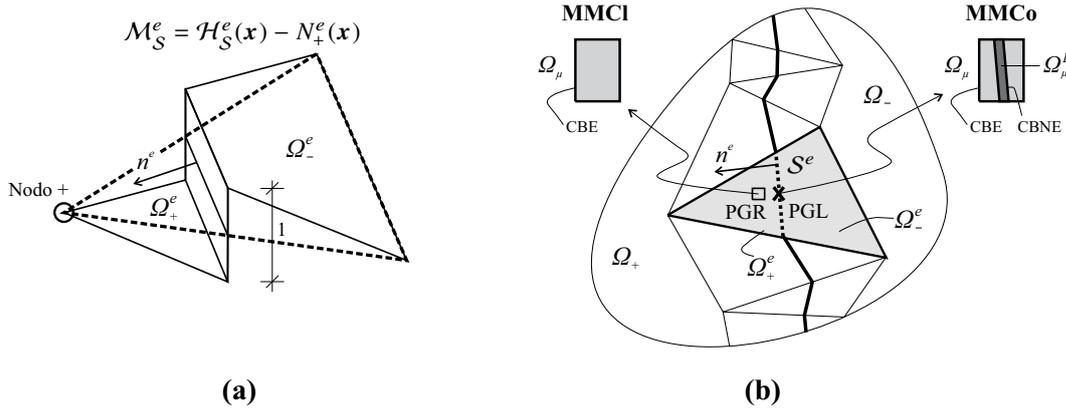


Figura 5.1: Técnica de elementos finitos con discontinuidades fuertes embebidas de soporte local, a nivel de la macro escala: (a) Función de forma enriquecida, M_S^e , para el modo discontinuo, (b) Dominio Ω discretizado con una malla de elementos finitos utilizando la metodología E-FEM.

El punto de integración regular PGR (identificado con un símbolo “□” en la Fig. 5.1-b) está relacionado con el dominio $\Omega^e \setminus \mathcal{S}^e$, por ende es utilizado para evaluar la componente regular de la deformación ε_R^e en la Ec. (5.2) y las integrales en la Ec. (5.7). Por otro lado, el punto de Gauss Localizado PGL (indicado con el símbolo “×” en la Fig. 5.1-b) está asociado al dominio \mathcal{S}^e . Ambos puntos, PGR y PGL, se utilizan para satisfacer la condición de continuidad de tracciones (Ec. (5.9)) a través de la interfaz de discontinuidad \mathcal{S}^e :

$$\underbrace{d\sigma^e}_{PGR} \mathbf{n}^e = \underbrace{dT^e}_{PGL} \quad (5.11)$$

En el contexto multiescala en estudio, cada punto de integración está directamente relacionado con su correspondiente RVE, ver Fig. 5.1-b, implicando que la respuesta constitutiva en estos puntos de Gauss sólo se conoce una vez realizado el análisis micromecánico correspondiente. Por este motivo, esta Subsección debiera interpretarse como la metodología numérica propuesta para realizar el salto de escala a nivel del modelo numérico.

Previo a la bifurcación material macroscópica ($t < t_N$) ambos RVEs (ambos puntos de Gauss PGR y PGL) evolucionan idénticamente, debido a que se ha adoptado un elemento finito base con deformaciones

ε_R^e constantes. De esta forma, la Ec. (5.11) se verifica trivialmente. Durante la etapa estable del material y atendiendo a cuestiones de eficiencia computacional, sólo uno de estos dos RVEs es resuelto vía un salto de escala y la ecuación de continuidad de tracciones (Ec. (5.11)), para el elemento en estudio, ni siquiera se incorpora en la formulación.

Si el proceso de carga continua hasta alcanzar y superar el punto de bifurcación macro ($t > t_N$), cada RVE asociado a los puntos PGR y PGL evoluciona siguiendo caminos de carga diferentes, tal como se explica a continuación.

El Modelo Multiescala Clásico (MMCI), ya definido en el Cap. 3, es el que se utiliza para el procedimiento de homogeneización de tensiones en el punto PGR, durante la historia completa de carga. De esta forma, según el MMCI, se inserta en forma homogénea el incremento de deformación regular $d\varepsilon_R^e$ en el RVE correspondiente, obteniendo el incremento de tensión homogeneizada $d\sigma^e$, para dicho punto de integración, ver Ec. (3.19) (procedimiento convencional de homogeneización de tensiones). Luego de detectar bifurcación macro, se impone una respuesta elástica incremental en cada punto del RVE asociado al PGR, restringiendo dicho punto de Gauss macro para que se comporte según un modelo de elasticidad homogeneizada, aunque considerando la (posible) existente degradación local en subdominios de la microescala. Esta es una técnica bien aceptada y de uso corriente en el modelado fenomenológico de falla por activación de fisuras, ya que representa la física esperable de descarga elástica en el entorno de la zona de proceso de fractura. Aquí simplemente se la ha adaptado a un contexto multiescala.

Por otro lado, cuando se alcanza la condición de bifurcación, se utiliza el Modelo Multiescala Cohesivo (MMCo), definido en el Cap. 4, para homogeneizar el incremento de tracción en el punto de integración PGL, hasta el final del proceso de carga. De acuerdo a este modelo la cinemática generalizada, caracterizada por $\{d\varepsilon_R^e, d\beta^e\}$, se inserta en el RVE correspondiente al PGL según lo indicado por las Ecs. (4.1), (4.2) y (4.6), esto es una inserción homogénea de $d\varepsilon_R^e$ más una inserción localizada (no homogénea) asociada al modo $d\beta^e$. Se recuerda que para este modelo se prescriben dos condiciones de borde: (i) las condiciones de borde estándar (CBE) en la frontera del RVE como también (ii) las condiciones de borde adicionales, no estándar propuestas en este trabajo (CBNE), sobre la frontera del dominio con localización de deformaciones micro Ω_μ^L . Resulta imprescindible imponer las restricciones cinemáticas, muy en particular la CBNE, en forma incremental (ver más adelante la Sec. 6.1). El incremento de la tracción cohesiva homogeneizada, dT^e , se obtiene luego mediante la fórmula generalizada de homogeneización dada por la Ec. (4.26) (procedimiento no-estándar de homogeneización propuesto en este trabajo).

5.4. Determinación de la condición de bifurcación en la macroescala

A nivel de la escala macro y una vez que el esquema iterativo de Newton-Raphson ha convergido al equilibrio para el paso de carga en estudio, se evalúa la condición de bifurcación (Ec. (2.24) de la Sec. 2.5), mediante un procedimiento muy simple descrito a continuación.

En cada punto de cuadratura de la malla de elementos finitos (recordar que debido a la interpolación propuesta existe un único punto de integración por elemento antes de la bifurcación) se calcula el tensor *Constitutivo Homogeneizado* C^e , a partir de la versión discreta de la Ec. (3.35). Una vez obtenido C^e es posible también calcular el tensor de *Localización Homogeneizado*, Q^e , dada una dirección normal $n^e(\theta^e)$. Observe que se utiliza el Modelo Multiescala Clásico (MMCI) para determinar C^e y por ende Q^e . Luego mediante un algoritmo de búsqueda se determina el valor mínimo:

$$\omega^e = \min_{\theta^e=0:\Delta\theta:\pi} \det(Q^e(n^e(\theta^e))) \quad (5.12)$$

típicamente predefiniendo un incremento angular suficientemente pequeño: $\Delta\theta$. Cuando se encuentra la condición $\omega^e(\theta^e) \leq 0$ por primera vez en la historia de carga y para algún valor θ^e , la variable que lleva en cuenta el estado de bifurcación de dicho punto de integración se setea a “VERDADERA”: se ha obtenido el tiempo de nucleación, $t_N^e \in [0, t_F]$, de la fisura cohesiva macro S^e para el elemento finito “e” en estudio. En general, si existe la condición $\omega^e(\theta^e) \leq 0$, se obtienen dos soluciones admisibles $\{\theta_{n^e}^e, \theta_{\gamma^e}^e\}$ las cuales definen, respectivamente, el vector normal a la fisura cohesiva macro n^e y el vector de velocidad de

apertura inicial γ^e . Si bien existen metodologías más eficientes para encontrar la singularidad del tensor de localización Q^e , la técnica descrita es más que suficiente para los fines del presente trabajo.

Capítulo 6

Implementación Numérica del Modelo Micro

El fenómeno de falla a nivel micro se inicia a partir del mecanismo de localización de deformaciones en bandas. Este fenómeno es inducido por la presencia de leyes constitutivas con ablandamiento material, que caracterizan la física a nivel micromecánico. Este tipo de modelos requieren técnicas de *regularización constitutiva*, a fin de permanecer bien colocados desde el punto de vista matemático (y por ende numérico). En este capítulo se detalla un esquema numérico muy simple, adoptado para tal finalidad.

También en esta parte del trabajo se presentan los aspectos numéricos relevantes que caracterizan el modelo micro, a saber: (i) cuál es el procedimiento propuesto para resolver el problema discreto de auto-equilibrio micromecánico y (ii) cómo se impone numéricamente la compatibilidad cinemática entre las escalas involucradas, específicamente se hace referencia a la técnica numérica para gestionar en forma flexible/eficiente condiciones de borde propias del modelo multiescala.

De acuerdo a lo discutido en el capítulo anterior, todos los desarrollos presentados a continuación están vinculados a un punto de integración en la escala macro: PGR o PGL (Sec. 5.3).

Para la siguiente presentación se asume problemas bidimensionales (\mathbb{R}^2), aunque es posible extenderlas a tres dimensiones.

6.1. Cinemática

6.1.1. Cinemática del campo de fluctuaciones

El proceso de falla a nivel micro se modela siguiendo la aproximación de fisura difusa (*Smeared Crack Approach*, SCA, Rots et al. (1985); Oliver et al. (1990)) aplicada a leyes constitutivas con ablandamiento. Esta aproximación, si bien posee limitaciones, representa la metodología más simple para simular daño y degradación distribuida, permitiendo así enfocar el esfuerzo de este trabajo en cuestiones más fundamentales que deben resolverse en el ámbito del modelado multiescala de falla material, inherentes al desarrollo de una teoría consistente desde un punto de vista mecánico/variacional en relación al *mecanismo de acoplamiento* entre las escalas involucradas.

Por lo tanto, la cinemática del campo de fluctuaciones de desplazamiento a nivel del RVE resulta ser una cinemática convencional (continua). En esta característica se basa las cinemáticas adoptadas en las microescalas según lo visto Secs. 3.1 y 4.2. Considere entonces el dominio Ω_μ del RVE (cuya frontera es Γ_μ), discretizado por una malla de elementos finitos clásicos. La interpolación del campo de desplazamientos fluctuantes adquiere la forma:

$$\tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^{n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu}} N_{i\mu}(\mathbf{y}) \mathbf{q}_i \quad (6.1)$$

donde $N_{i\mu}(\mathbf{y})$ es la función de forma estándar (global) correspondiente al nodo “ i ”, \mathbf{q}_i representa el valor

nodal de la fluctuación de desplazamiento para el mismo nodo y $n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu}$ simboliza el número total de nodos de la malla. El campo $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, en este contexto, se interpreta como el campo de desplazamiento fluctuante micro *discreto*. El vector que colecta las fluctuaciones de desplazamiento de todos los nodos se denota como \mathbf{q} siendo su dimensión: $n_{\text{gdI}}^{\Omega_\mu} = 2 n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu}$ (como se dijo, se considera problemas en \mathbb{R}^2 , con dos grados de libertad por nodo). Luego $n_{\text{gdI}}^{\Omega_\mu}$ es el número de grados de libertad totales del problema discreto micro. Dado que es importante escribir las ecuaciones del modelo en forma incremental, se define también $\Delta \mathbf{q}$ como el incremento de desplazamientos fluctuantes, a nivel de la microescala. Este vector se descompone según los nodos de la malla de elementos finitos:

$$\Delta \mathbf{q} = \left[\Delta \mathbf{q}_1 \mid \dots \mid \Delta \mathbf{q}_i \mid \dots \mid \Delta \mathbf{q}_{n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu}} \right] \quad (6.2)$$

donde $\Delta \mathbf{q}_i$ es el vector incremento de desplazamiento fluctuantes del nodo i .

6.1.2. Ejemplos de espacios funcionales discretos para submodelos del MMCI y del MM-Co

Tal como se discutió en los Caps. 3 y 4, pueden definirse diferentes submodelos multiescalas de acuerdo a la elección de los espacios funcionales $\{\mathcal{U}_\mu, \mathcal{V}_\mu\}$ (para el modelo MMCI, etapa estable, ver Sec. 3.10) o bien $\{\mathcal{U}_\mu^L, \mathcal{V}_\mu^L\}$ (para el modelo MMCo, etapa inestable, ver Sec. 4.7). De esta forma, el vector de incremento (discreto) de desplazamientos fluctuantes $\Delta \mathbf{q}$, solución del problema mecánico micro, deberá buscarse en diferentes subespacios según el caso.

Como ejemplo se presenta la discretización de los espacios de desplazamiento fluctuantes de los submodelos del MMCI presentados en la Sec. 3.10, que son los más utilizados en la literatura. Su presentación sirve como base para proponer un procedimiento general para el tratamiento de las restricciones de la formulación (Sec. 6.1.3).

Se define \mathcal{U}_q como el espacio vectorial de dimensión finita para los incrementos de desplazamientos fluctuantes nodales admisibles ($\Delta \mathbf{q} \in \mathcal{U}_q$) y \mathcal{V}_q como el correspondiente espacio de variaciones virtuales cinemáticamente admisibles $\hat{\mathbf{q}}$ ($\hat{\mathbf{q}} = \Delta \mathbf{q}_2 - \Delta \mathbf{q}_1$ con $\Delta \mathbf{q}_2, \Delta \mathbf{q}_1 \in \mathcal{U}_q$). En correspondencia con las expresiones de la Sec. 3.10 del modelo continuo, es posible caracterizar la versión discreta de cada uno de estos espacios:

a) Submodelo de *Taylor*:

$$\mathcal{U}_q^{\text{Tay}} = \mathcal{V}_q^{\text{Tay}} = \left\{ \Delta \mathbf{q} \mid \Delta \mathbf{q} = \mathbf{0} \right\} \quad (6.3)$$

b) Submodelo *Lineal*:

$$\mathcal{U}_q^{\text{Lin}} = \mathcal{V}_q^{\text{Lin}} = \left\{ \Delta \mathbf{q} \mid \Delta \mathbf{q}_i = \mathbf{0} \quad \forall \text{ nodo } i \in \Gamma_\mu \right\} \quad (6.4)$$

donde $\Delta \mathbf{q}_i$ es vector incremento de desplazamiento fluctuantes del nodo i .

c) Submodelo *Periódico Clásico*: considere la frontera Γ_μ del RVE particionada en dos subdominios Γ_μ^+ y Γ_μ^- , tal que para cualquier punto $\mathbf{y}_i^+ \in \Gamma_\mu^+$ existe el correspondiente punto $\mathbf{y}_i^- \in \Gamma_\mu^-$, alineado con la dirección de periodicidad. Si en esta partición de Γ_μ es posible encontrar, para todo par de puntos biunívocos $\{\mathbf{y}_i^+, \mathbf{y}_i^-\}$, vectores normales a la frontera externa que cumplen: $\mathbf{v}_\mu(\mathbf{y}_i^+) = -\mathbf{v}_\mu(\mathbf{y}_i^-)$, se puede definir un submodelo periódico clásico. Este debe satisfacer la restricción: $\Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}_i^+) = \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}_i^-)$. Luego, los espacios discretos de desplazamientos fluctuantes admisibles pueden expresarse como:

$$\mathcal{U}_q^{\text{Per}} = \mathcal{V}_q^{\text{Per}} = \left\{ \Delta \mathbf{q} \mid \Delta \mathbf{q}_i^+ = \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}_i^-) \quad \forall \text{ nodo } i^+ \in \Gamma_\mu^+ \right\} \quad (6.5)$$

donde se asume que la restricción, $\Delta \mathbf{q}_i^+ = \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}_i^-)$ se introduce para cada nodo i^+ in Γ_μ^+ . y no se requiere a-priori la existencia de un nodo en la posición \mathbf{y}_i^- , en donde la *interpolación* del desplazamiento fluctuante está restringida a tener el mismo desplazamiento que el nodo i^+ .

d) Submodelo de *Mínima Restricción cinemática*:

$$\mathcal{U}_q^{\text{Min}} = \mathcal{V}_q^{\text{Min}} = \left\{ \Delta \mathbf{q} \mid \int_{\Gamma_\mu} \sum_i N_{i\mu}(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{q}_i \otimes^s \mathbf{v}_\mu(\mathbf{y}) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \forall \text{nodo } i \in \Gamma_\mu \right\} \quad (6.6)$$

donde Γ_μ es la frontera de la microcelda Ω_μ y \mathbf{v}_μ es el vector normal a esa frontera.

Como ejemplos de submodelos, y correspondientes espacios, que es posible definir en la etapa inestable (MMCo), se presentan las versiones discretas de los indicados en la Sec. 4.7.

e) Submodelo de *Mínima Restricción sobre Ω_μ y Lineal sobre Ω_μ^L* :

$$\mathcal{U}_{q_{\text{Ej1}}}^L = \mathcal{V}_{q_{\text{Ej1}}}^L = \left\{ \Delta \mathbf{q} \mid \int_{\Gamma_\mu} \sum_i N_{i\mu}(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{q}_i \otimes^s \mathbf{v}_\mu(\mathbf{y}) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \forall \text{nodo } i \in \Gamma_\mu \wedge \Delta \mathbf{q}_j = \mathbf{0} \quad \forall \text{nodo } j \in \Gamma_\mu^L \right\} \quad (6.7)$$

f) Submodelo de *Periodicidad Clásica sobre Ω_μ y Mínima Restricción sobre Ω_μ^L* :

$$\mathcal{U}_{q_{\text{Ej1}}}^L = \mathcal{V}_{q_{\text{Ej1}}}^L = \left\{ \Delta \mathbf{q} \mid \Delta \mathbf{q}_i^+ = \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}_i^-) \quad \forall \text{nodo } i^+ \in \Gamma_\mu^+ \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} \sum_j N_{j\mu}(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{q}_j \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L(\mathbf{y}) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \forall \text{nodo } j \in \Gamma_\mu^L \right\} \quad (6.8)$$

En las expresiones de los espacios de incrementos cinemáticamente admisibles, \mathcal{U}_q y \mathcal{U}_q^L , y de variaciones virtuales cinemáticamente admisibles, \mathcal{V}_q y \mathcal{V}_q^L , se asume que los espacios discretos son funciones cuadrados integrables, es decir pertenecientes al espacio \mathbf{H}^1 . También se considera implícitamente incorporadas las restricciones para evitar movimientos rígidos.

6.1.3. Tratamiento numérico de las restricciones cinemáticas

El modelo MMCo propuesto (Cap. 4) exige la incorporación de condiciones de borde no estándar (CBNE), junto a condiciones de borde estándar (CBE), para la definición de los espacios funcionales del problema variacional. Dentro de las mismas (restricciones cinemáticas mínimas), se pueden definir diferentes submodelos según sea más conveniente para cada tipo de problema (ver ejemplos de los Puntos e) y f) de Sec. 6.1.2). Esto motiva la proposición de una metodología numérica general para el tratamiento, en forma sistemática, de las condiciones de borde de las formulaciones multiescala (Toro et al. 2013c). Este tratamiento facilita la programación de un código de elementos finitos que sea aplicable a microceldas con geometrías arbitrarias y diversos tipos de CBE y CBNE (submodelos) de la formulación propuesta.

El procedimiento numérico se basa principalmente en generalizar el dominio de aplicación sobre el que se definen las restricciones y considerar que, en general, las condiciones de borde son lineales y homogéneas sobre el desplazamiento fluctuante (Sec. 6.1.2).

Caso i) Tratamiento de nodos con incrementos de desplazamientos fluctuantes prescritos a cero:

Sean n_c grados de libertad con restricciones cinemáticas del tipo: $\Delta \mathbf{q}_j = \mathbf{0}$, donde el subíndice j representa la j -ésima componente del vector $\Delta \mathbf{q}$. Entonces, se agrupa todas las restricciones en un único sistema de ecuaciones lineales homogéneas, de la siguiente forma:

$$\mathbf{I}^c \Delta \mathbf{q} = \mathbf{0} \quad (6.9)$$

donde $\mathbf{I}^c \in \mathbb{R}^{n_c \times n_{\text{gd}}^{\Omega_\mu}}$ es una matriz con unos (1) en la posición (k, j) ($I_{kj}^c = 1$) y ceros en los lugares remanentes. El índice k ($k = 1, \dots, n_c$) corresponde a la k -ésima ecuación que prescribe a cero el j -ésimo grado de libertad del vector $\Delta \mathbf{q}$.

El bloque de ecuaciones de la Ec. (6.9) abarca tanto las restricciones por movimiento rígido de la microcelda (necesaria en casi todos los submodelos), como las de Taylor y Lineal, sobre cualquier dominio (Ω_μ ó Ω_μ^L), ver por ejemplo los espacios de las Ecs. (6.3), (6.4) y (6.7).

Caso ii) Conexión o Vínculo rígido, que impone idéntico incremento de desplazamiento fluctuante entre un nodo y un punto (ver Fig. 6.1):

Se piensa en una conexión rígida que vincula los incrementos de desplazamiento fluctuante del nodo $k \in \Gamma_\mu^+$ ($\Delta \mathbf{q}_k$), en la posición \mathbf{y}^+ , con el incremento de desplazamiento fluctuante del punto \mathbf{y}^- (discreto):

$$\Delta \mathbf{q}_k = \Delta \tilde{\mathbf{u}}_\mu(\mathbf{y}^-) = \sum_{i=1}^{n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu}} N_{i\mu}(\mathbf{y}^-) \Delta \mathbf{q}_i \quad (6.10)$$

donde el término de la derecha es el valor nodal del campo de incremento de desplazamientos fluctuantes interpolado en el punto \mathbf{y}^- .

Este tipo restricción permite resolver problemas multiescalas donde se imponen periodicidad de desplazamientos, con una dirección de periodicidad arbitraria (Figs. 6.1 y 6.3), no necesariamente paralela a los lados de la microcelda. Esta dirección define qué pares de puntos asociados, $\{\mathbf{y}_i^+, \mathbf{y}_i^-\}$, sobre la frontera tiene un *vínculo rígido* (es decir, con igualdad de incrementos de desplazamientos dado por la Ec. (6.10)). Estos puntos se identifican a partir de la intersección de la dirección de periodicidad con la frontera Γ_μ . Esta restricción puede considerarse como un submodelo *periódico generalizado*.

Las condiciones de borde periódicas clásicas (Ec. (6.5)) están incluidas dentro de este tipo de restricción, donde las direcciones de periodicidad son perpendiculares a lados paralelos, es decir que $\mathbf{v}_\mu^+(\mathbf{y}^+) = -\mathbf{v}_\mu^-(\mathbf{y}^-)$ (ver Punto c de Sec. 6.1.2).

En un submodelo periódico genérico, como mostrado en la Fig. 6.1 tienen que ser prescriptas n_p ecuaciones vectoriales como la Ec. (6.10), donde n_p es el número de nodos en Γ_μ^+ . El sistema total de ecuaciones puede ser escrito de la siguiente manera:

$$(\mathbf{I}^P - \mathbf{N}_\mu) \Delta \mathbf{q} = \mathbf{0} \quad (6.11)$$

donde $\mathbf{I}^P \in \mathbb{R}^{(2n_p \times n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu})}$ es una matriz con unos (1) en la posición (k, l) ($\mathbf{I}_{kl}^P = 1$) y ceros en los lugares sobrantes. El índice k corresponde a la k -ésima ecuación, la cual impone la restricción del l -ésimo grado de libertad en $\Delta \mathbf{q}$. El punto $\mathbf{y}^- \in \Gamma_\mu^-$, donde el desplazamiento fluctuante es prescripto mediante la ecuación k -ésima, es asociado con las funciones de forma $N_{i\mu}(\mathbf{y}^-)$ de los nodos $i \in \Omega_\mu$ (más específicamente, de los nodos i del elemento que contiene la coordenada \mathbf{y}^- , ya que en el resto es nula). Estas funciones de forma son usadas para ensamblar la matriz $\mathbf{N}_\mu \in \mathbb{R}^{(2n_p \times n_{\text{nod}}^{\Omega_\mu})}$ dada en la Ec. (6.11).

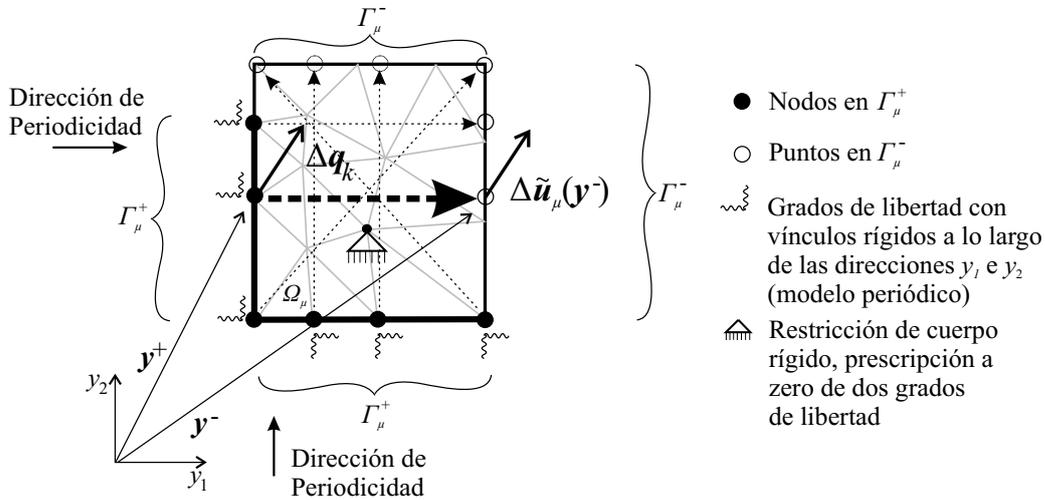


Figura 6.1: Microcelda de dominio Ω_μ y malla de elementos finitos con condiciones de borde periódicas clásicas (vínculo rígido).

Las restricciones cinemáticas periódicas, impuestas en la frontera completa $\Gamma_\mu = \Gamma_\mu^- \cup \Gamma_\mu^+$, inhibe las rotaciones de cuerpo rígido pero no traslaciones de cuerpo rígido. Entonces, para definir un problema mecánico de este tipo, bien colocado en la microescala, se deben restringir dos grados de libertad adicionales mediante la Ec. (6.9), como esquematizado en la Fig. 6.1. Además, cuando se usa condiciones periódicas (Ec. (6.10)) en la frontera, y particularmente cuando \mathbf{y}^- no coincide con los nodos de la malla, se observa que es una buena práctica incorporar restricciones adicionales del tipo de Mínima Restricción (Caso iii) para mejorar la precisión en el cálculo numérico.

Caso iii) Imposición de incrementos de deformación fluctuante con media volumétrica nula en una región genérica $\check{\Omega}_\mu$, limitada por la superficie (frontera) $\check{\Gamma}_\mu$ (Fig. 6.2):

$$\int_{\check{\Gamma}_\mu} \sum_i N_{i\mu}(\mathbf{y}) \Delta \mathbf{q}_i \otimes^s \check{\mathbf{v}}_\mu(\mathbf{y}) d\Gamma = \mathbf{0} \quad \forall \text{ nodo } i \in \check{\Gamma}_\mu \quad (6.12)$$

donde $\check{\mathbf{v}}_\mu$ es el vector normal exterior a la frontera $\check{\Gamma}_\mu$.

La Ec. (3.11) prescribe restricciones del tipo de Mínima Restricción en Ω_μ , que es equivalente a imponer un valor nulo de la media volumétrica, en Ω_μ , de los incrementos de deformación fluctuante. En forma análoga se puede imponer una restricción similar sobre el dominio $\check{\Omega} \subseteq \Omega_\mu$, limitado por la superficie cerrada $\check{\Gamma}_\mu$, como la Ec. (6.12). La razón de la misma es imponer la condición de Mínima Restricción en el dominio Ω_μ^L y así definir los espacios variacionales admisibles requeridos por el modelo MMCo (Punto d de Sec. 4.7).

Este tipo de prescripción sobre $\check{\Gamma}_\mu$ (Ec. (6.12)) puede ser reescrito de la siguiente forma:

$$\mathbf{H} \Delta \mathbf{q} = \mathbf{0} \quad (6.13)$$

donde la matriz $\mathbf{H} \in \mathbb{R}^{3 \times n_{\text{gd}}^{\Omega_\mu}}$ es el ensamblaje de “ n_{el} ” matrices elementales \mathbf{H}^e (n_{el} es el número de elementos finitos de la malla inscrita en el dominio $\check{\Omega}$ y que tiene al menos un lado sobre $\check{\Gamma}_\mu$):

$$\mathbf{H} = \bigwedge_{e=1}^{n_{\text{el}}} \int_{\check{\Gamma}_\mu^e} \mathbf{H}^e d\Gamma \quad (6.14)$$

donde $\check{\Gamma}_\mu^e$ es el lado del elemento que pertenece al dominio $\check{\Gamma}_\mu$. La matriz \mathbf{H}^e está dada por:

$$\mathbf{H}^e = [\mathbf{H}_1^e \mid \mathbf{H}_2^e \mid \dots \mid \mathbf{H}_r^e] = \left[\begin{array}{cc|cc|cc} \check{v}_{y_1} N_{1\mu}^e & 0 & \dots & \check{v}_{y_1} N_{r\mu}^e & 0 & \dots \\ 0 & \check{v}_{y_2} N_{1\mu}^e & \dots & 0 & \check{v}_{y_2} N_{r\mu}^e & \dots \\ \check{v}_{y_2} N_{1\mu}^e & \check{v}_{y_1} N_{1\mu}^e & \dots & \check{v}_{y_2} N_{r\mu}^e & \check{v}_{y_1} N_{r\mu}^e & \dots \end{array} \right] \quad (6.15)$$

donde la matriz \mathbf{H}^e está formada por $r = n_{\text{nod}}^{\text{el}}$ ($n_{\text{nod}}^{\text{el}}$ es el número de nodos del elemento) sub-bloques de matrices de dimensión: $\mathbb{R}^{3 \times 2}$ (para el problema en dos dimensiones); un sub-bloque de matrices por cada nodo. El factor $N_{i\mu}^e$ es la función de forma (local) del nodo i correspondiente al elemento e ($N_{i\mu}^e \equiv N_{i\mu} \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^e$). En las Ecs. (6.14) y (6.15) se considera implícito que el sub-bloque \mathbf{H}_l^e ($\mathbb{R}^{3 \times 2}$) asociado con el nodo l que no está sobre la frontera $\check{\Gamma}_\mu$, es nulo.

La restricción de la Ec. (6.13), se utiliza en el caso particular que $\check{\Gamma}_\mu \equiv \Gamma_\mu$ (Ec. (6.6)), como en los casos de las Ecs. (6.7) y (6.8). Se debe incorporar un bloque de la Ec. (6.13) por cada subdominio donde se impone una condición de incrementos de deformación fluctuante nula.

Las restricciones cinemáticas dadas por la Ec. (6.13) no restringen los movimientos de cuerpo rígido de la microcelda. Por ello, para definir un problema variacional de equilibrio bien condicionado, se deben incorporar al submodelo tres restricciones (Ec. (6.9)) adicionales, sobre sendos grados de libertad, como es esquematizado en la Fig. 6.2

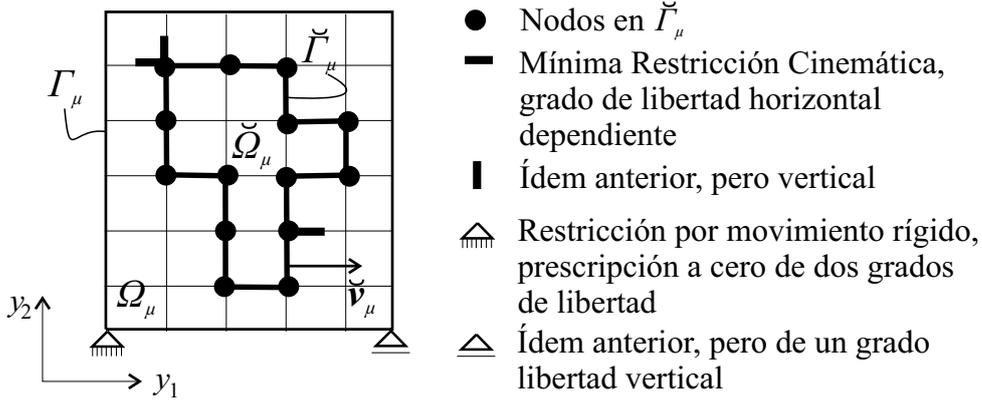


Figura 6.2: Microcelda con dominio Ω_μ y mallita de elementos finitos con incrementos de deformaciones fluctuantes de media nula, sobre la región $\check{\Omega}_\mu$ con límites dados por la curva $\check{\Gamma}_\mu$.

Caso iv) Restricciones híbridas, se considera como la combinación de cualquiera de las restricciones consideradas en los puntos previos (Fig. 6.3):

La motivación de este tipo de restricciones es el tratamiento generalizado de las condiciones de borde necesarias para el modelo MMCo (Sec. 4.3), es decir, se resuelve como tratar en *conjunto* las CBE con las CBNE (ver los ejemplos presentados en la Sec. 6.1.2). A su vez, permite resolver problemas donde es conveniente imponer una condición de borde que favorezca un cierto modo de falla, como se explica a continuación.

En el ejemplo de la Sec. 7.6.4 se utiliza una estrategia donde es necesario imponer conexiones rígidas (Caso ii), prescribiendo idéntico incremento de desplazamientos fluctuantes sobre nodos fronteras que están sobre una dirección arbitraria. El par de puntos \mathbf{y}^+ (en Γ_μ^+) e \mathbf{y}^- (en Γ_μ^-) son vinculados para tener iguales incrementos de desplazamiento fluctuante. Los puntos $\{\mathbf{y}_i^+, \mathbf{y}_i^-\}$ son los que están en la intersección de la dada dirección con la frontera Γ_μ del RVE, como indicado en la Fig. 6.3. Las prescripciones se imponen sobre el par $\{\mathbf{y}_i^+, \mathbf{y}_i^-\}$ por medio de la Ec. (6.10).

En este caso, aún cuando se impone desplazamiento idénticos sobre los pares de puntos frontera, los correspondientes vectores normales no necesariamente satisfacen la identidad $\mathbf{v}_\mu^- = -\mathbf{v}_\mu^+$. Por lo tanto la restricción de la Ec. (3.11) (media nula de deformaciones fluctuantes $d\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$) no es automáticamente garantizada y debe ser implícitamente impuesta. Para ello, se incorpora al problema la restricción del Caso iii (Ec. (6.13)), con $\check{\Gamma}_\mu \equiv \Gamma_\mu$.

Además, se debe restringir los movimientos de cuerpo rígido de la microcelda agregando restricciones del Caso i (Ec. (6.9)).

Todos los tipos de restricciones cinemáticas pueden ser impuestas a través de los siguientes bloques de ecuaciones lineales:

$$\begin{aligned} \mathbf{I}^c \Delta \mathbf{q} &= \mathbf{0} \\ (\mathbf{I}^p - \mathbf{N}_\mu) \Delta \mathbf{q} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{H} \Delta \mathbf{q} &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (6.16)$$

de esta forma (para un problema 2D), el sistema tiene n_c ecuaciones por la Ec. (6.9), $2n_p$ ecuaciones por la Ec. (6.11) (al incorporar n_p vínculos rígidos) y tres ecuaciones por la Ec. (6.13).

En general, cada problema multiescala tiene un sistema de ecuaciones lineales diferente. Esto dependerá del submodelo adoptado en la microescala, el cuál posiblemente a su vez varía a lo largo de su evolución (etapa estable o inestable). Por ello algunos casos se deberá quitar ecuaciones con respecto a la Ec. (6.16) (por ejemplo imponiendo solamente condición de borde Lineal en la frontera Γ_μ^L) o incorporar adicionales (por ejemplo, si se impone Mínima Restricción en el Ω_μ^L , donde se debe incorporar un bloque adicional de ecuaciones del Caso iii). No obstante, al ser

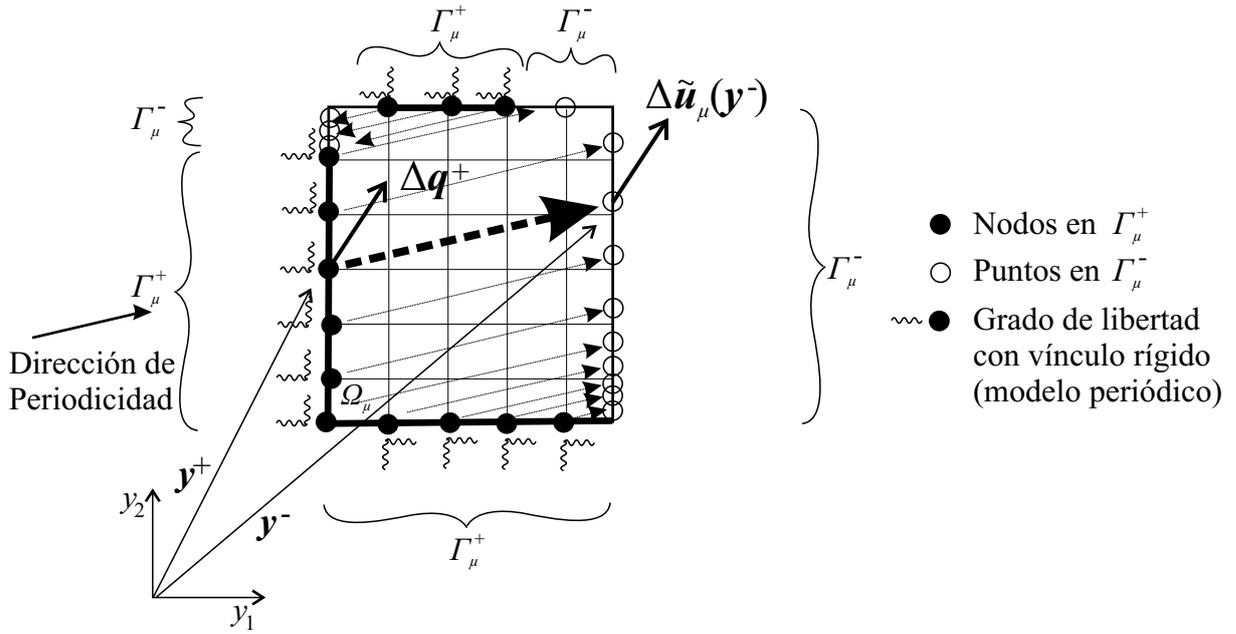


Figura 6.3: Microcelda de dominio Ω_μ y discretización de elementos finitos. Condiciones de borde híbridas.

todas las restricciones lineales con respecto al desplazamiento, es posible generalizar el caso de la Ec. (6.16) como sigue:

$$\mathbf{J}\Delta\mathbf{q} = \mathbf{0} \quad (6.17)$$

con

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \mathbf{I}^c \\ \mathbf{I}^p - \mathbf{N}_\mu \\ \mathbf{H} \end{bmatrix} \quad (6.18)$$

con $\mathbf{J} \in \mathbb{R}^{(m \times n_{\text{gd}}^{\Omega_\mu})}$, siendo $m = n_c + 2n_p + 3$.

6.2. Resolución del problema de equilibrio no lineal discreto en la micro-escala

6.2.1. Particionamiento de los grados de libertad y condensación estática de la matriz de condiciones de borde

El sistema de ecuaciones de la Ec. (6.17) define una partición natural (cantidad de grados de libertad que quedan definidos, en función de otros, por el sistema de ecuaciones lineal) del vector $\Delta\mathbf{q} = [\Delta\mathbf{q}_d, \Delta\mathbf{q}_f]^T$, donde $\Delta\mathbf{q}_d \in \mathbb{R}^m$ almacena todos los grados de libertad dependientes, y $\Delta\mathbf{q}_f$ recoge los grados de libertad independientes (libres). Usando estos grupos de grados de libertad, la matriz \mathbf{J} y el sistema de ecuaciones de la Ec. (6.17) puede ser particionado y rescrito como:

$$\mathbf{J}\Delta\mathbf{q} = \begin{bmatrix} \mathbf{J}_d & \mathbf{J}_f \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta\mathbf{q}_d \\ \Delta\mathbf{q}_f \end{bmatrix} = \mathbf{0} \quad (6.19)$$

a partir de la cual, condensando estáticamente los grados de libertad $\Delta\mathbf{q}_d$, se obtiene:

$$\Delta\mathbf{q}_d = \mathbf{L} \Delta\mathbf{q}_f \quad (6.20)$$

donde $\mathbf{L} = -(\mathbf{J}_d)^{-1} \mathbf{J}_f$.

De esta forma se puede escribir los espacios discretos, \mathcal{U}_q y \mathcal{V}_q , para cada submodelo del RVE, con la siguiente notación unificada:

$$\mathcal{U}_q \equiv \left\{ \Delta \mathbf{q} = [\Delta \mathbf{q}_d, \Delta \mathbf{q}_f]^T \mid \Delta \mathbf{q}_d = \mathbf{L} \Delta \mathbf{q}_f \right\} \quad (6.21)$$

$$\mathcal{V}_q \equiv \left\{ \hat{\mathbf{q}} = [\hat{\mathbf{q}}_d, \hat{\mathbf{q}}_f]^T \mid \hat{\mathbf{q}}_d = \mathbf{L} \hat{\mathbf{q}}_f \right\} \quad (6.22)$$

La matriz \mathbf{J} , considerando las distintas de restricciones descritas en la Fig. 6.4 y en la Ec. (6.16), se puede subdividir como se muestra a seguir:

$$m \left\{ \begin{array}{l} n_c \{ \\ 2n_p \{ \\ 3 \{ \end{array} \left[\begin{array}{ccc|c} \mathbb{I}^c & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{J}_{dc}^p & \mathbb{I}^p & \mathbf{J}_{dh}^p & \mathbf{J}_f^p \\ \mathbf{J}_{dc}^h & \mathbf{J}_{dp}^h & \mathbf{J}_{dh}^h & \mathbf{J}_f^h \end{array} \right] \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{q}_d^c \\ \Delta \mathbf{q}_d^p \\ \Delta \mathbf{q}_d^h \\ \vdots \\ \Delta \mathbf{q}_f \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} \quad (6.23)$$

6.2.2. Estrategia para la resolución del sistema de ecuaciones del problema de elementos finitos

El problema de equilibrio no lineal de elementos finitos de la microcelda, escrito en términos de los incrementos de los desplazamientos fluctuantes, puede ser escrito de la siguiente manera:

$$\hat{\mathbf{q}}^T \cdot \mathbf{R} = \hat{\mathbf{q}}^T \cdot \underbrace{\left[\bigwedge_{e=1}^{n_{el}} \int_{\Omega_\mu^e} (\mathbf{B}_\mu^e)^T \Delta \boldsymbol{\sigma}_\mu d\Omega \right]}_{\mathbf{R}} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{q}} \in \mathcal{V}_q \quad (6.24)$$

donde \mathbf{R} representa el vector de residuos incremental de las fuerzas internas, \bigwedge es el operador estándar de ensamblaje, n_{el} es el número de elementos finitos en la malla del RVE, \mathbf{B}_μ^e es la matriz de deformaciones elemental, Ω_μ^e es el dominio del elemento finito en la microescala. El incremento de tensiones micro $\Delta \boldsymbol{\sigma}_\mu$ depende de la historia de deformaciones $\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t$ (ver Ec. (3.23)) y del incremento de las deformaciones micro $\Delta \boldsymbol{\varepsilon}_\mu$ (y en consecuencia, por la Ec. (3.7), de $\Delta \mathbf{q}$).

El sistema de ecuaciones no lineal resultante (Ec. (6.24)), después de tener en cuenta las restricciones sobre el espacio discreto de los incrementos cinemáticamente admisibles (Ec. (6.21)) y sobre las variaciones virtuales cinemáticamente admisibles Ec. (6.21), puede ser resuelto mediante un esquema iterativo de Newton-Raphson. Una iteración típica puede ser escrita de la siguiente forma:

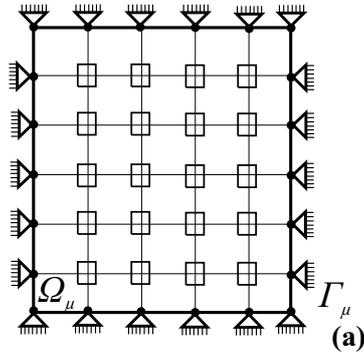
$$\begin{bmatrix} \mathbf{L} \hat{\mathbf{q}}_f \\ \hat{\mathbf{q}}_f \end{bmatrix}^T \cdot \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{R}_d \\ \mathbf{R}_f \end{bmatrix}^{(k-1)} + \underbrace{\begin{bmatrix} \mathbf{K}_{dd} & \mathbf{K}_{df} \\ \mathbf{K}_{fd} & \mathbf{K}_{ff} \end{bmatrix}}_{\mathbf{K}}^{(k-1)} \begin{bmatrix} \mathbf{L} D\mathbf{q}_f \\ D\mathbf{q}_f \end{bmatrix}^{(k)} \right\} = 0 \quad \forall \hat{\mathbf{q}}_f \quad (6.25)$$

donde \mathbf{K} es la matriz Jacobiana del residuo, $\mathbf{K} = \partial \mathbf{R} / \partial \Delta \mathbf{q}$ y $D\mathbf{q}_f$ es el incremento de $\Delta \mathbf{q}_f$ en la iteración k . La Ec. (6.25) es dividida de acuerdo a la partición del vector $[\Delta \mathbf{q}_d, \Delta \mathbf{q}_f]^T$ (Sec. 6.2.1).

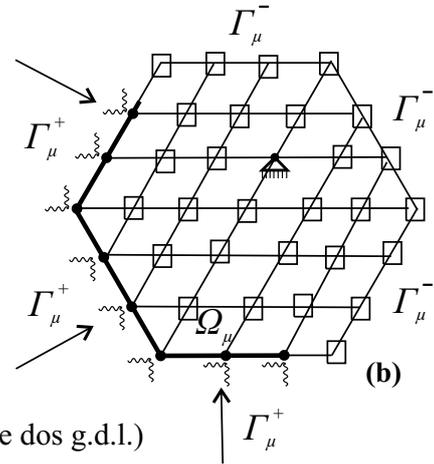
A partir de la Ec. (6.25) se condensa los grados de libertad dependientes y se obtiene el sistema lineal a resolver en cada interacción k :

$$\left(\mathbf{L}^T \mathbf{K}_{dd} \mathbf{L} + \mathbf{L}^T \mathbf{K}_{df} + \mathbf{K}_{fd} \mathbf{L} + \mathbf{K}_{ff} \right)^{(k-1)} D\mathbf{q}_f^{(k)} = - \left[\mathbf{R}_f + \mathbf{L}^T \mathbf{R}_d \right]^{(k-1)} \quad (6.26)$$

Modelo Lineal incremental



Modelo Periódico incremental

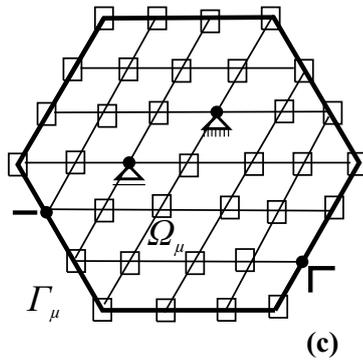


Δq_d^c  (mov. rígido, prescripción a cero de dos g.d.l.)
 Δq_d^c  (mov. rígido, prescripción a cero de un g.d.l.)

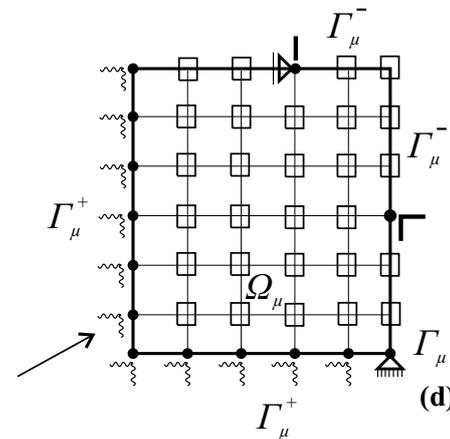
Δq_d^p  (restricción periódica de un g.d.l. horizontal)
 Δq_d^p  (restricción periódica de un g.d.l. vertical)

Δq_d^h  (mínima restricción cinemática, g.d.l. horizontal)
 Δq_d^h  (mínima restricción cinemática, g.d.l. vertical)

Δq_f 



Modelo de Restricción cinemática Mínima incremental



Modelo híbrido incremental

Figura 6.4: Ejemplos típicos de restricciones cinemáticas para diferentes submodelos de RVE, abarcando diferentes clases y particiones de grados de libertad: a) Submodelo lineal; b) Submodelo periódico generalizado, con la flechas indicando la dirección de la periodicidad; c) Modelo de mínima restricción cinemática; d) Submodelo híbrido.

Parte IV

Ejemplos Numéricos

Esta Parte de la tesis se divide en dos grandes bloques: el Cap. 7 y el Cap. 8.

En el primero de ellos (Cap. 7) se presentan resultados numéricos sólo a nivel de la micro escala, es decir se analiza un conjunto de micro-estructuras heterogéneas sujetas a caminos arbitrarios de deformaciones macro impuestas. Estos ejemplos nos permiten evaluar el desempeño de la formulación multiescala propuesta en relación a cuestiones fundamentales del modelo, como ser la objetividad de la respuesta homogeneizada respecto al tamaño del RVE, consistencia energética, etc.

Por el contrario, en el Cap. 8 se muestran ejemplos de aplicación más complejos e interesantes que consideran el acoplamiento entre ambas escalas (macro y micro). En estos ensayos numéricos se muestra que el procedimiento propuesto para el intercambio de información entre las escalas involucradas posee fundamento mecánico. Se presentan también comparaciones entre los resultados obtenidos mediante la aplicación de la formulación multiescala desarrollada en esta tesis y a una técnica de Simulación Numérica Directa (DNS por sus siglas en inglés *Direct Numerical Simulation*).

Capítulo 7

Modelo Multiescala aplicado a problemas Microestructurales

7.1. Preliminares

En este capítulo se muestra una serie de problemas direccionados específicamente al análisis microestructural. Se estudian al detalle tópicos fundamentales de la metodología multiescala propuesta, como por ejemplo: el fenómeno de nucleación y evolución de bandas con deformaciones localizadas en el RVE, la influencia que tiene la generación de estos mecanismos de degradación en cuanto a la detección de inestabilidad material homogeneizada, la objetividad de la respuesta macro homogeneizada respecto al tamaño del RVE, entre otros ítems.

Algunos de ejemplos numéricos a desarrollar en este capítulo reúnen una serie de características comunes, a saber:

- En general, las microestructuras adoptadas poseen una distribución simple de heterogeneidades.
- En los ejemplos numéricos aquí analizados no se resuelven las ecuaciones de equilibrio macro. De esta forma, el problema micromecánico se define mediante la inserción de una historia arbitraria de deformaciones macro generalizadas, dada por la inserción sucesiva de incrementos $\{d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}\}$, en cada instante de análisis.
- En todos los casos presentados en las Secs. 7.2 a 7.5, el subdominio Ω_μ^L , en donde toma lugar el proceso de localización de deformaciones a nivel micro, está preinducido desde el comienzo del análisis mediante la definición de las propiedades materiales. Así, la frontera Γ_μ^L de Ω_μ^L también está preinducida. A diferencia, en el último ejemplo (ver Sec. 7.6), a diferencia, toda la microcelda (exceptuando los poros) tiene definido el mismo material y con régimen de ablandamiento. En todos los casos, para la detección del dominio Ω_μ^L y, en consecuencia, de Γ_μ^L , se utiliza el procedimiento descrito Sec. 4.8, aún en los casos que se preinduce la zona de localización de deformaciones.
- En todos los casos presentados en las Secs. 7.2 a 7.5, se utiliza mínima restricción cinemática (ver Secs. 3.10 y 6.1.2) para la condición de borde estándar (CBE), es decir durante la etapa estable material, a la cual se le adiciona una restricción de tipo lineal (ver Sec. 4.7) sobre la frontera del subdominio localizado (Ω_μ^L) una vez detectado el instante de bifurcación (condición de borde no estándar CBNE). Por otro lado, en el problema desarrollado en la Sec. 7.6 se realiza un estudio particular sobre la influencia que tienen diferentes condiciones de borde en el modo de falla obtenido, por lo tanto, para dicho ejemplo, se discuten en detalle las distintas variantes analizadas.

7.1.1. Configuración general de los ejemplos

Se adopta un sistema genérico de unidades: la unidad de longitud está representada por $[L]$ y la unidad de fuerza por $[F]$.

Para modelar la respuesta material a nivel micro se consideran dos leyes constitutivas fenomenológicas invíscidas convencionales, a saber:

- Un modelo elasto-plástico isotrópico tipo J_2 , caracterizado por los siguientes parámetros materiales: Modelo de Young, E_μ , relación de Poisson, ν_μ , tensión de fluencia, $\sigma_{Y\mu}$ y energía de fractura por unidad de superficie, $G_{F\mu}$.
- Un modelo de daño elástico isotrópico (escalar), el cual viene caracterizado por los parámetros materiales dados a continuación: E_μ , ν_μ , $\sigma_{u\mu}$, $G_{F\mu}$, donde $\sigma_{u\mu}$ representa la tensión última uniaxial.

Observe que todo parámetro material asociado a la escala micro se simboliza agregando el correspondiente sub-índice $(\bullet)_\mu$.

Se tienen en cuenta mecanismos de ablandamiento lineal y/o exponencial para ambos modelos de materiales, véase [Simo y Hughes \(1998\)](#), [Simo y Ju \(1987\)](#) para una descripción detallada de estas leyes fenomenológicas clásicas. Como se mencionó anteriormente, se adopta un esquema de regularización basado en el concepto de fisura difusa (*Smearred Crack Approach*, SCA). De esta forma, el módulo de ablandamiento inicial $H_{\mu 0}$ el cual depende, entre otros parámetros, de la longitud característica microestructural $\ell_{ch} = E_\mu G_{F\mu} / \sigma_{Y\mu}^2$, se regulariza según lo indicado en la Tabla 7.1. En todos los ejemplos, el ancho de la banda de localización de deformaciones, ℓ_μ , se corresponde con el tamaño de elemento finito que compone la banda. No obstante, debe notarse que en situaciones más generales, este parámetro será un resultado derivado de la evaluación del dominio Ω_μ^L en el RVE.

La integración numérica de las leyes constitutivas a nivel micro sigue un esquema de Euler retrasado (implícito) convencional.

	Ablandamiento lineal	Ablandamiento exponencial
Plasticidad- J_2	$H_{\mu 0} = \frac{E_\mu \ell_\mu}{2 \ell_{ch}}$	$H_{\mu 0} = E_\mu \frac{\ell_\mu}{\ell_{ch}}$
Daño-elástico	$H_{\mu 0} = \frac{1}{2} \frac{\ell_\mu}{\ell_{ch}}$	$H_{\mu 0} = \frac{\ell_\mu}{\ell_{ch}}$

Tabla 7.1: Módulo de ablandamiento inicial $H_{\mu 0}$, de acuerdo al modelo constitutivo adoptado.

Los incrementos de deformación macro arbitraria a insertar en la microestructura, dados por $\{d\boldsymbol{\varepsilon}_R, \mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})\}$, se han parametrizado de la siguiente forma:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_R = d\chi(t) (\boldsymbol{\Lambda} \otimes^s \boldsymbol{\Theta}) \quad ; \quad \boldsymbol{\Lambda} = \begin{bmatrix} \cos(\Lambda) \\ \sin(\Lambda) \end{bmatrix} \quad ; \quad \boldsymbol{\Theta} = \begin{bmatrix} \cos(\Theta) \\ \sin(\Theta) \end{bmatrix} \quad (7.1)$$

$$\mathcal{I}_y^L(d\psi(t) d\boldsymbol{\beta}) = d\psi(t) \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{(d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n})}{\ell_\mu} \quad ; \quad d\boldsymbol{\beta} = \begin{bmatrix} \cos(\beta) \\ \sin(\beta) \end{bmatrix} \quad ; \quad \mathbf{n} = \begin{bmatrix} \cos(\eta) \\ \sin(\eta) \end{bmatrix} \quad (7.2)$$

donde Λ , Θ y β son ángulos arbitrarios que se definirán para cada ejemplo en particular, $\phi_\mu^L(\mathbf{y})$ es la función de colocación dada por la Ec. (4.5) y \mathbf{n} es el vector normal a la fisura cohesiva macro, parametrizado mediante el ángulo η el cual se determina en forma analítica en cada caso (según el criterio de bifurcación dado en Sec. 5.4). Los coeficientes $d\chi(t)$ y $d\psi(t)$ definen la magnitud de los incrementos de deformaciones regulares y localizadas, respectivamente.

Como se aprecia en la Ec. (7.2), el modo de deformación localizado se ha expresado en término de la normal macro \mathbf{n} . Esto difiere levemente de la definición teórica dada para el operador de inserción $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$, ver Ec. (4.4) en el Cap. 4, ya que allí interviene el vector normal a las bandas de localización micro \mathbf{n}_μ . No obstante, en los ejemplos analizados en este capítulo, existe una coincidencia prácticamente exacta entre las normales macro y micro, dada la simplicidad de las microestructuras adoptadas. Esto

permite conocer a-priori cual será la normal de localización y de esta forma insertar una deformación coherente con dicho modo de falla. En situaciones más generales, como por ejemplo las que se discutirán en detalle el Capítulo siguiente, el operador de inserción sólo puede definirse una vez detectado el dominio de falla micro, el cual puede adquirir cierta tortuosidad lo que implica variaciones espaciales del vector \mathbf{n}_μ . Es decir, en casos generales, no será posible predefinir un modo de deformación localizada, éste resultará de la propia evolución mecánica de la microcelda.

Se recuerda que este capítulo de la tesis está dirigido a analizar el concepto de objetividad de la respuesta homogeneizada respecto al tamaño del RVE, una propiedad fundamental que debe satisfacer cualquier formulación multiescala bien formulada mecánicamente. Así para cada ejemplo numérico se define: (i) una celda microestructural básica, denominada RVE₁ y (ii) microceldas adicionales denominadas RVE₂, RVE₃, etc., las cuales se obtienen simplemente mediante repeticiones de la microestructura básica (RVE₁). La respuesta macro homogeneizada se calcula luego para los diferentes RVEs generados, utilizando para tal fin dos formulaciones multiescala:

- El modelo MMCI, descrito en Cap. 3, para la historia completa de carga. En este caso no se incorpora ningún tipo de enriquecimiento cinemático ($d\boldsymbol{\beta} \equiv \mathbf{0} \forall t$). El problema micromecánico queda regulado íntegramente por la inserción de $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ que evoluciona en forma creciente monotónicamente durante todo el proceso de carga, hasta agotar el material.
- La aproximación FMOF (Sec. 2.6), la cual contempla al modelo MMCI discutido en el Cap. 3 secuencialmente acoplado, al tiempo $t = t_N$, con el modelo MMCo (ver Cap. 4). En este caso, para $t = t_N$, se produce un cambio en la cinemática macro inducido por la incipiente activación de un modo localizado de deformación caracterizado por las variables $\{d\boldsymbol{\beta}, \mathbf{n}\}$, el cual es insertado en forma no homogénea en el dominio del RVE. Precisamente, la definición de ese procedimiento de inserción fue discutido en el Cap. 4 y en el contexto actual viene dado por la Ec. (7.2), en total coherencia con lo que estipula el modelo teórico MMCo. Además, para $t > t_N$, también se necesita controlar el incremento de deformación regular $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ aplicado el RVE. En algunos ejemplos se considera: $d\boldsymbol{\varepsilon}_R = \mathbf{0}$ para $t > t_N$. En otras situaciones $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ decrece, tal como uno esperaría si se resolviese el problema completo macro-micro acoplado. De todas formas, para $t > t_N$, el término de deformación localizado, $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$, es dominante comparado con $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$. Por lo tanto, la respuesta cohesiva homogeneizada no resulta demasiado sensible a la elección particular del camino impuesto para las deformaciones regulares¹.

Para todos los ejemplos se asumen condiciones compatibles con un estado plano de deformaciones.

7.2. Microestructuras con bandas de localización homogéneas

7.2.1. Caso (a): Bandas de localización horizontales

El primer ejemplo consiste en el análisis de microceldas que presentan bandas embebidas de material homogéneo, donde es viable el desarrollo del proceso de localización de deformaciones. La geometría para la micro estructura heterogénea básica, denominada RVE₁, se observa en la Fig. 7.1-a en forma general (según se definan sus parámetros geométricos se obtienen distintas microceldas); en este caso se define: $h = b = 1 [L]$ y $\alpha = 0^\circ$ (bandas horizontales). Las Figs. 7.1-b y 7.1-c muestran además las microceldas adicionales, RVE₂ y RVE₃, utilizadas para el análisis de objetividad de la respuesta. El material M_1 es lineal elástico mientras que el material M_2 viene caracterizado por un modelo de daño-elástico isótropo dotado de ablandamiento lineal o exponencial. La Tabla 7.2 describe las propiedades materiales para M_1 y M_2 . El ancho de banda de localización, ℓ_μ , representa el espesor donde el campo de deformaciones micro localiza. Se ha adoptado un valor $\ell_\mu = 0,091 [L]$ para los tres RVEs, coincidente con el tamaño del elemento finito en la dirección de \mathbf{n} . El módulo de ablandamiento inicial regularizado, $H_{\mu 0}$, se calcula a partir de las expresiones dadas en la Tabla 7.1

¹En un entorno multiescala completo, la cinemática incremental macro $\{d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta}\}$ no se impone en forma arbitraria sino que ésta se obtiene tras resolver el problema de equilibrio macroscópico, ver los ejemplos numéricos del capítulo siguiente.

	$E_\mu [F/L^2]$	ν_μ	$\sigma_{u\mu} [F/L^2]$	$G_{F\mu} [F/L]$	$\ell_{ch} [L]$
Material: M_1	2.1e4	0.2	—	—	—
Material: M_2	2.5e3	0.2	42	0.60	0.85

Tabla 7.2: Propiedades materiales para las micro estructuras mostradas en la Fig. 7.1

En la Fig. 7.1-f se muestra la malla utilizada para el RVE₁ compuesta por 3 elementos finitos cuadrangulares convencionales, mientras que el modelo discreto para el RVE₂ y RVE₃ contiene 6 y 9 elementos respectivamente.

Para la primer simulación numérica se considera: $\Lambda = \Theta = 90^\circ$, $d\chi = 1e-5$, ver Fig. 7.1-d. Notar que con estas definiciones se modelan microceldas sujetas a una deformación regular axial puramente vertical, es decir sólo $\varepsilon_{Ryy} \neq 0$, véase la Ec. (7.1).

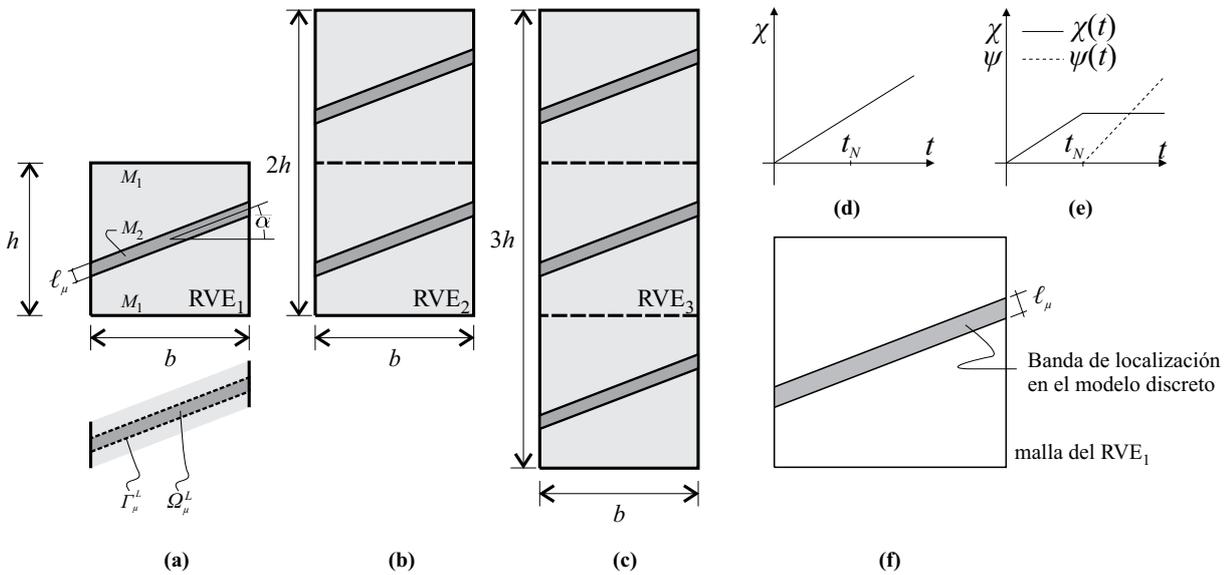


Figura 7.1: Microestructuras con bandas homogéneas de localización de deformaciones: (a) RVE₁ (3 elementos finitos en el modelo discreto), (b) RVE₂ (6 elementos finitos en el modelo discreto), (c) RVE₃ (9 elementos finitos en el modelo discreto), (d) Función $\chi(t)$ utilizada para el modelo MMCI, (e) Función $\chi(t)$ y función $\psi(t)$ utilizadas para el modelo FMOF, (f) Discretización por elementos finitos para el RVE₁.

En las Figs. 7.2-a y 7.2-b se observa la relación constitutiva homogeneizada en términos de las componentes axiales σ_{yy} vs. ε_{Ryy} , que se obtiene al aplicar el modelo MMCI, tanto para el modelo de ablandamiento lineal como el exponencial, respectivamente. Durante el rango elástico, identificado con el tramo $A-B$ en las figuras, la respuesta mecánica macro es idéntica para los 3 tamaños de RVE considerados. Así, la respuesta constitutiva MMCI es objetiva respecto a este parámetro de análisis. No obstante, cualquier incremento de deformación regular macro a partir del punto B origina una diferencia muy evidente entre las respuestas dependiendo del tamaño del RVE, ver los tramos indicados como $B-C_1$, $B-C_2$ y $B-C_3$.

El punto B marca el instante de tiempo para el cual el modelo MMCI pierde objetividad. Este instante coincide con el tiempo $t = t_N$ denominado tiempo de nucleación de una fisura macro S con normal \mathbf{n} , el cual se obtiene utilizando el procedimiento descrito en la Sec. 5.4 (basado en las propiedades espectrales del Tensor Constitutivo Tangente Homogeneizado \mathbf{C}). El vector \mathbf{n} , también calculado mediante el criterio mencionado, es consistente con la dirección de las bandas de ablandamiento definidas en la micro estructura.

Los resultados obtenidos tras aplicar el modelo MMCo, una a vez superado el punto B ($t > t_N$), se muestran en la Fig. 7.3. Allí, las respuestas cohesivas homogeneizadas se grafican en términos de las componentes cartesianas T_y vs. β_y . Para $t > t_N$, el modo localizado de deformación insertado, $\mathbf{I}_y^L(d\psi(t) d\beta)$,

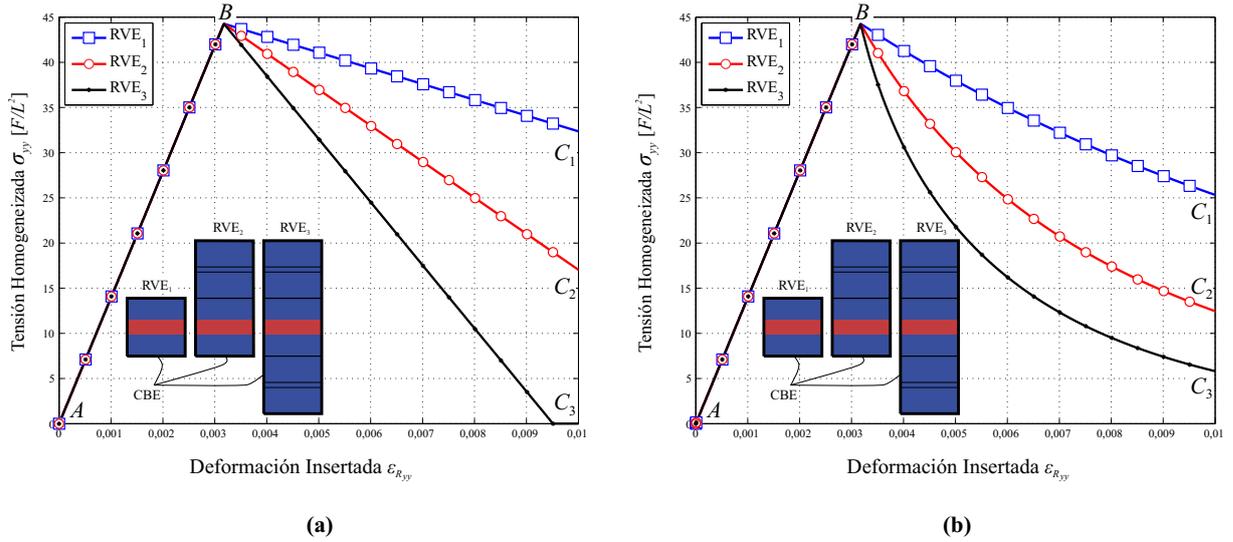


Figura 7.2: Relación tensión-deformación homogeneizada (σ_{yy} vs. ε_{Ryy}) obtenida utilizando el modelo MMCI: (a) Ablandamiento Lineal, (b) Ablandamiento exponencial.

está definido por: $\beta = 90^\circ$, $d\psi = 1,5 e-4$ y $\eta = 90^\circ$, ver Ec. (7.2). Además, la componente regular ε_R permanece constante e igual a $\varepsilon_R(t = t_N)$. La Fig. 7.1-e muestra una representación esquemática de las funciones $\chi(t)$ y $\psi(t)$ que controlan las deformaciones generalizadas aplicadas al RVE durante la historia completa de carga. Observe que la parametrización adoptada define un modo de apertura puro (Modo I) para la fisura cohesiva macro.

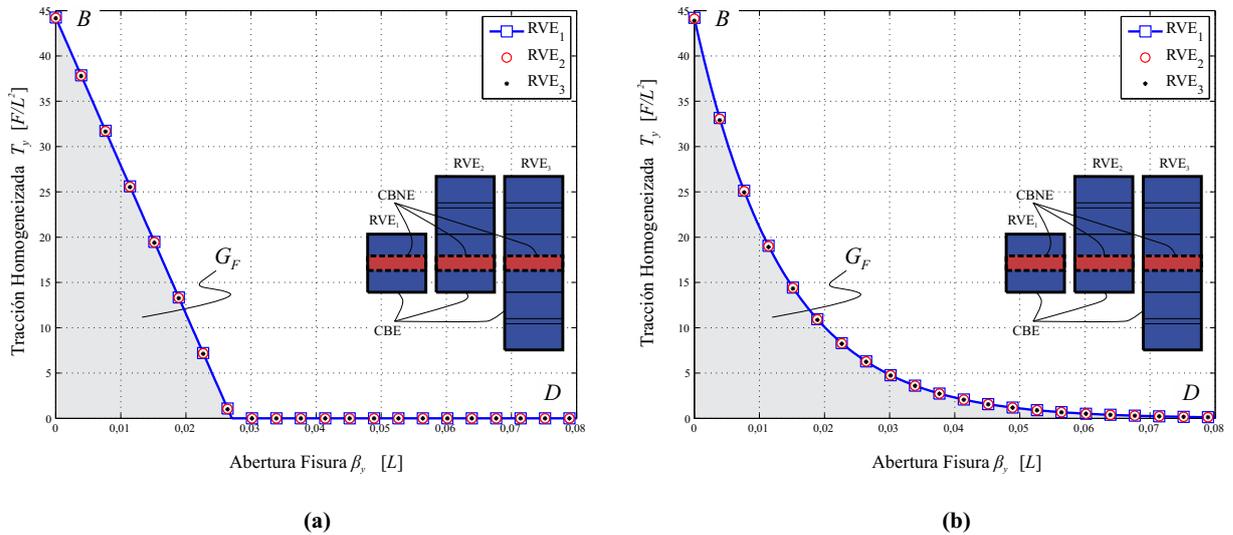


Figura 7.3: Respuesta cohesiva homogeneizada (T_y vs. β_y) obtenida utilizando el modelo MMCo, para $t > t_N$: (a) Ablandamiento Lineal, (b) Ablandamiento Exponencial.

Como queda en evidencia a partir de la Fig. 7.3, el modelo MMCo provee una respuesta cohesiva objetiva durante el régimen poscrítico material. Esta característica importante se mantiene para ambos modelos de ablandamiento, lineal y exponencial, ver los tramos indicados como B-D en las Figs. 7.3-a y 7.3-b, para los distintos tamaños de RVE.

El área bajo la curva T_y - β_y , es decir la zona sombreada con color gris en las Figs. 7.3-a y 7.3-b, define la energía de fractura homogeneizada por unidad de área, aquí denominada G_F . Observe que el modelo multiescala cohesivo propuesto provee una medida objetiva de G_F , independientemente del tamaño del RVE. En este caso particular, debido a simplicidad del ejemplo², la energía de fractura macro calculada

²El inicio del comportamiento no lineal en la micro escala coincide con la activación de la fisura cohesiva macro y además

a partir de la integración de la curva T_y - β_y coincide con la energía de fractura definida para el material M_2 a nivel de la micro estructura ($G_F \equiv G_{F\mu}$), para ambos modelos de daño (lineal y exponencial).

La respuesta constitutiva completa, dada por la formulación variacional propuesta en este trabajo (FMOF), provee dos respuestas homogeneizadas para diferentes intervalos de tiempo (es decir para diferentes regímenes de comportamiento material):

- (i) la solución MMCI, para $t < t_N$, tramo A - B en la Fig. 7.2;
- (ii) la solución MMCo, para $t > t_N$, tramo B - D en la Fig. 7.3.

7.2.2. Caso (b): Bandas de localización inclinadas

A continuación se analiza un nuevo ejemplo numérico considerando idénticas propiedades para los materiales M_1 y M_2 , del caso previo. Por simplicidad, esta vez sólo se adopta un modelo de daño con ablandamiento de tipo exponencial. La diferencia con el problema anterior radica en que ahora la topología heterogénea micro estructural considera bandas homogéneas con localización de deformaciones, las cuales son inclinadas. Los parámetros geométricos que definen los RVEs considerados son los mismos indicados en la Figura 7.1, excepto que ahora se considera el parámetro $\alpha = 20^\circ$, el cual determina la orientación de las bandas con ablandamiento.

El procedimiento de inserción para los incrementos de deformaciones macro regulares, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, como así también para la componente localizada, $\mathcal{I}_y^L(d\boldsymbol{\beta})$, está definido por los parámetros siguientes: $\Theta = \beta = 60^\circ$, $\Lambda = \eta = 110^\circ$ (ver Ecs. (7.1) y (7.2)). Como resultado, una vez que se activa la fisura cohesiva a nivel macro, se estará simulando un Modo Mixto de fractura. Un aspecto importante a remarcar es que, en lo referente a las condiciones de borde para la etapa estable del material (CBE), es decir para $t < t_N$, se aplican mínimas restricciones cinemáticas sobre la frontera Γ_μ de Ω_μ (ver Sec. 7.1). Este tipo de restricción cinemática habilita la nucleación de bandas de ablandamiento inclinadas, mientras que otros tipos de condiciones de borde (como por ejemplo Lineal o Periódica convencional) pueden coartar dicho patrón de falla.

Los coeficientes que controlan la historia de carga generalizada, $d\chi(t)$ y $d\psi(t)$, son idénticos a los ya definidos para el ejemplo previo, véase Figs. 7.1-d y 7.1-e.

En la Fig. 7.4 se observan resultados numéricos obtenidos a partir del modelo MMCI. En particular, la Fig. 7.4-a muestra la respuesta constitutiva homogeneizada tensión-deformación en términos de las componentes axiales σ_{yy} vs. ε_{Ryy} , mientras que la Fig. 7.4-b en función de las componentes tangenciales σ_{xy} vs. ε_{Rxy} . Durante el régimen precrítico, tramo A - B en los gráficos, la respuesta macroscópica homogeneizada es objetiva respecto al tamaño del RVE. Sin embargo esta característica se pierde luego de sobrepasar el punto B , ver los tramos B - C_1 , B - C_2 y B - C_3 en la misma figura. A medida que se incrementa el tamaño del RVE se obtienen respuestas homogeneizadas más frágiles, sin tendencia alguna hacia soluciones coherentes. Este resultado prueba que la noción básica/elemental relacionada a la existencia de un tamaño físicamente admisible de RVE se pierde totalmente al intentar modelar falla material utilizando reglas convencionales de homogeneización, socavando así uno de los pilares fundamentales de toda teoría multiescala.

Tal como se mencionó anteriormente, tanto el punto B como también el ángulo η que define el vector \boldsymbol{n} normal a la fisura macro, pueden detectarse automáticamente durante la simulación por medio del análisis de bifurcación discutido en la Sec. 5.4. En este caso, a partir de dicho análisis, se obtiene $\eta = 110^\circ$ valor que coincide exactamente con el ángulo de la normal a las bandas de localización pre-definidas en el RVE.

Las soluciones obtenidas con la técnica MMCo se muestran en la Fig. 7.5. Por ejemplo, en la Fig. 7.5-a se observa la respuesta cohesiva homogeneizada según las componentes T_y vs. β_y mientras que en la Fig. 7.5-b se muestran en términos de las componentes T_x vs. β_x . Notar, nuevamente, que el modelo MMCo posee el importante atributo de ser objetivo, insensible respecto al tamaño del RVE.

la banda de ablandamiento micro es homogénea.

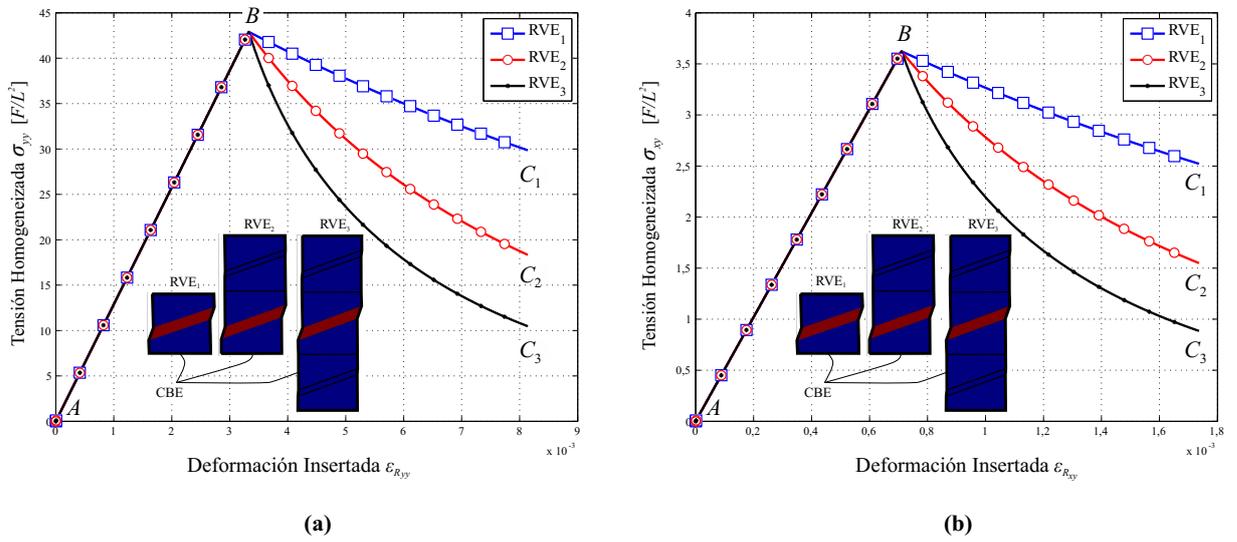


Figura 7.4: Respuesta tensión-deformación homogeneizada obtenida utilizando el modelo MMCI: (a) Relación axial σ_{yy} vs. ϵ_{Ryy} , (b) Relación tangencial σ_{xy} vs. ϵ_{Rxy} .

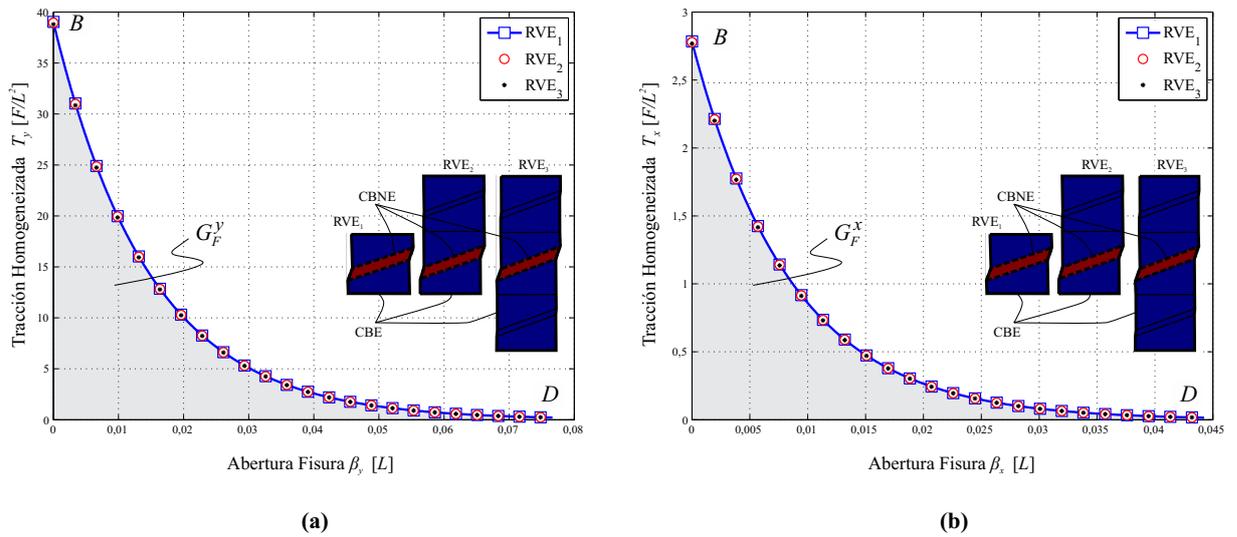


Figura 7.5: Respuesta cohesiva homogeneizada obtenida utilizando el modelo MMCo, para $t > t_N$: (a) Relación T_y vs. β_y , (b) Relación T_x vs. β_x .

En este caso, la energía de fractura a nivel macro, G_F , se obtiene sumando el área bajo la curva $T_y-\beta_y$ (aquí denotada como G_F^y) más el área bajo la curva $T_x-\beta_x$ (identificada con la variable G_F^x), es decir: $G_F = G_F^y + G_F^x$ (ver las zonas sombreadas con color gris en la Figs. 7.5-a y 7.5-b). Nuevamente, debido a la simplicidad del ejemplo, el valor calculado de G_F coincide con la energía de fractura definida para el material M_2 : $G_{F\mu} = 0,60 [F/L]$. Este hecho prueba coherencia energética.

En síntesis la metodología FMOF propuesta, la cual incluye el modelo MMCI para $t < t_N$ y el modelo MMCo para $t > t_N$, provee una respuesta mecánica objetiva durante la historia completa de carga y con disipación de energía consistente.

7.3. Microestructuras con bandas de localización no homogéneas

En este ejemplo, se modela un patrón micro estructural que incluye bandas horizontales proclives a presentar localización de deformaciones. Estas bandas son intrínsecamente heterogéneas dado que están compuestas por diferentes materiales con ablandamiento, simulando así la presencia de obstáculos y/o inclusiones débiles que afectan la evolución de los mecanismos de falla micro.

La topología heterogénea micro estructural básica, denominada RVE_1 , puede observarse en Fig. 7.6, como así también las microceldas adicionales asociadas al RVE_2 y RVE_3 . Las dimensiones características son: $h = b = 1 [L]$. El material M_1 es elástico lineal mientras que los materiales $\{M_2, M_3, M_4\}$, que constituyen las bandas de falla micro, responden a un modelo elasto-plástico tipo J_2 con ablandamiento lineal, ver en particular el zoom en la Fig. 7.6-a. En la Tabla 7.3 se describen todos los parámetros materiales. Observe que, para M_2, M_3 y M_4 , se han definido valores diferentes en la tensión de fluencia ($\sigma_{Y\mu}$) y en la energía de fractura ($G_{F\mu}$), así la longitud característica ℓ_{ch} también es diferente para estos materiales. El espesor de la banda con localización de deformaciones es $\ell_\mu = 0,091 [L]$, coincidente con el tamaño del elemento finito en la dirección ortogonal a la banda de falla.

En la Fig. 7.6-f se muestra la malla adoptada para el RVE_1 la cual está compuesta por 121 elementos finitos cuadrangulares. El modelo discreto para el RVE_2 y RVE_3 contiene 242 y 363 elementos, respectivamente.

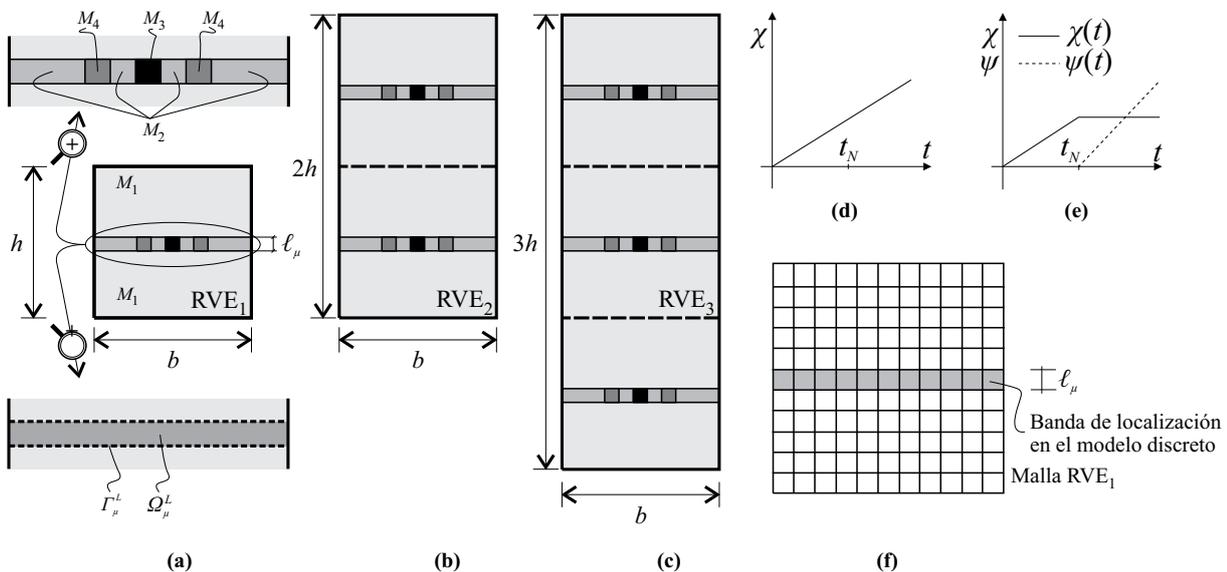


Figura 7.6: Microestructura con bandas no homogéneas de localización de deformaciones: (a) RVE_1 (121 elementos finitos en el modelo discreto), (b) RVE_2 (242 elementos finitos en el modelo discreto), (c) RVE_3 (363 elementos finitos en el modelo discreto), (d) Función $\chi(t)$ utilizada para el modelo MMCI, (e) Función $\chi(t)$ y función $\psi(t)$ utilizada para el modelo FMOF, (f) Discretización por elementos finitos para el RVE_1 .

Los incrementos de deformaciones generalizadas, transferidos desde la escala macro hacia la escala micro, quedan definidos a través de los ángulos: $\Lambda = \eta$ (η se evalúa mediante el criterio de nucleación, resultando: $\eta = 90^\circ$), $\Theta = \beta = 0^\circ$. Para la simulación numérica basada en el modelo MMCI, se adopta

	$E_\mu [F/L^2]$	ν_μ	$\sigma_{Y\mu} [F/L^2]$	$G_{F\mu} [F/L]$	$\ell_{ch} [L]$
Material: M_1	2.1e5	0.3	—	—	—
Material: M_2	2.0e4	0.3	42e1	3.80	0.43
Material: M_3	2.0e4	0.3	25e1	0.70	0.224
Material: M_4	2.0e4	0.3	48e1	21.00	1.82

Tabla 7.3: Propiedades materiales para las micro estructuras mostradas en la Fig. 7.6

$d\chi = 1e-5 \forall t$, ver Fig. 7.6-d. Alternativamente, para la metodología MMCo, se elige: $d\chi = 1e-5$ para $t \leq t_N$, $d\chi = 0$ para $t > t_N$ y $d\psi = 5e-4$ para $t > t_N$, véase la Fig. 7.6-e. Observe que los parámetros descritos definen un modo de corte puro ya sea para la etapa precrítica como para la poscrítica del material.

La respuesta tensión-deformación homogeneizada que provee el modelo MMCI, en términos de las componentes cartesianas σ_{xy} vs. ε_{Rxy} , puede observarse en la Fig. 7.7-a. Debido a la presencia de inclusiones de material débil en el dominio de la microcelda, léase material M_3 , el comportamiento no lineal comienza en el punto A' (marcado en el gráfico), mucho antes de alcanzar la carga límite. El punto B identifica el instante de bifurcación macro ($t = t_N$). Durante el tramo $A'-B$, se desarrollan mecanismos de degradación micro mecánicos con evolución de ablandamiento material. Sin embargo, dicho proceso inelástico irreversible no es suficiente para inducir inestabilidad material a nivel macro. Esta situación implica la existencia de un período de disipación de energía estable a nivel macro estructural, aún cuando se produce ablandamiento material en ciertos sub-dominios en la micro escala. Fenómenos complejos de este tipo sólo pueden capturarse vía formulaciones multiescalas. Advertir que el modelo MMCI brinda una respuesta homogeneizada objetiva en el tramo completo $A-B$, abarcando un comportamiento puramente elástico (tramo $A-A'$) pero también un comportamiento elasto-plástico con ablandamiento (tramo $A'-B$). Al sobrepasar el punto B la formulación clásica pierde objetividad constitutiva con respecto al tamaño del RVE, ver los tramos $B-C_1$, $B-C_2$ y $B-C_3$, en la Fig. 7.7-a, que corresponden a las soluciones del RVE₁, RVE₂ y RVE₃, respectivamente.

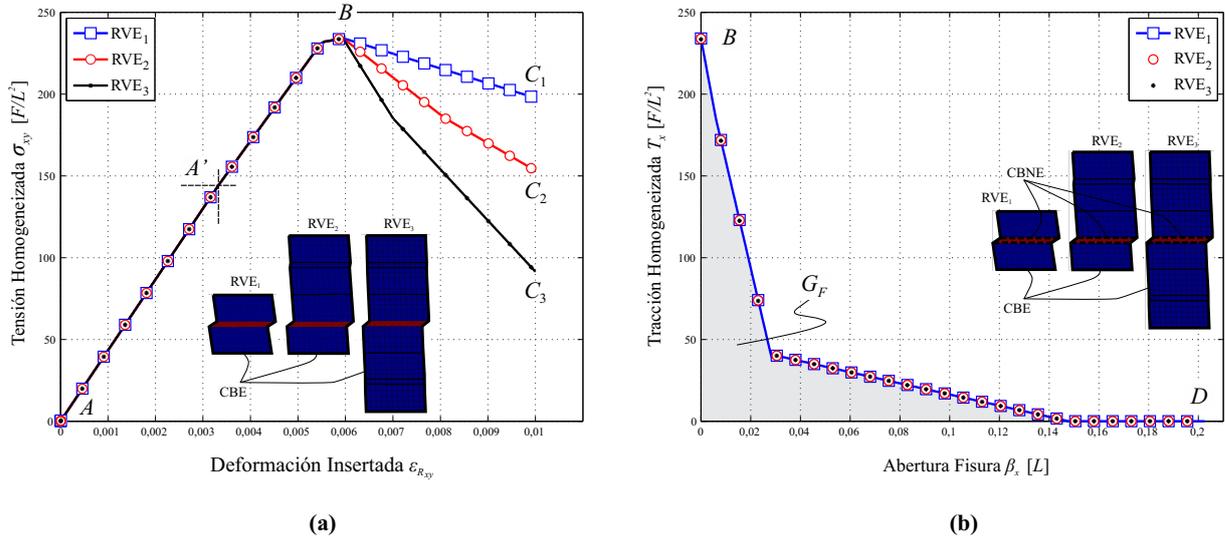


Figura 7.7: Respuesta constitutiva homogeneizada para micro estructuras con bandas no homogéneas de localización de deformaciones: (a) Relación σ_{xy} vs. ε_{Rxy} obtenida utilizando el modelo MMCI, (b) Relación T_x vs. β_x obtenida utilizando el modelo MMCo, para $t > t_N$.

El punto crítico B se captura correctamente con el criterio de bifurcación dado en la Sec. 5.4, el cual también provee el ángulo $\eta = 90^\circ$ que define el vector unitario normal \mathbf{n} y que caracteriza el modo localizado de deformación. En la formulación multiescala propuesta, se activa una fisura cohesiva macro cuando se alcanza el estado mecánico asociado al punto B . En la Fig. 7.6-a, puede observarse además la

definición del subdominio micro con localización de deformaciones Ω_μ^L .

Por último, la Fig. 7.7-b muestra la relación cohesiva homogeneizada, en términos de las componentes T_x vs. β_x , cuando se utiliza el modelo MMCo. Claramente, se observa una energía de fractura G_F físicamente admisible (objetiva), independiente del tamaño del RVE, véase los tramos B-D en la misma Figura. Note además que la respuesta homogeneizada cohesiva no es lineal aun cuando se han definido modelos con ablandamiento micro de tipo lineal. Esto es una consecuencia directa del proceso de falla no homogéneo que tiene lugar en la micro escala. Nuevamente estos fenómenos complejos, que ciertamente definen la respuesta de falla macro, son sólo posibles de observar y capturar utilizando técnicas multiescalas.

7.4. Microestructuras con poros circulares

Este ejemplo se basa en una topología micro estructural que contiene dos tipos de heterogeneidades: (i) micro poros y (ii) bandas horizontales susceptibles de presentar localización de deformaciones. En la Fig. 7.8 se observan los 3 RVEs considerados para el análisis: RVE₁, RVE₂ y RVE₃. Las dimensiones características del problema son: $h = b = 1 [L]$, mientras que la relación de porosidad se establece en $f_v = |\Omega_\mu^{\text{vacíos}}|/|\Omega_\mu| = 0,12$. El material M_1 es elástico lineal y M_2 responde según un modelo elasto-plástico tipo J_2 con ablandamiento exponencial, ver Fig. 7.8-a. La Tabla 7.4 define todos los parámetros constitutivos para la microestructura. En este caso, el espesor de la banda de localización es: $\ell_\mu = 0,025 [L]$.

La Fig. 7.8-f muestra la malla de elementos finitos utilizada en las simulaciones numéricas para el RVE₁, la cual está formada por 720 elementos cuadrangulares. El modelo discreto para el RVE₂ y RVE₃ contiene 1440 y 2160 elementos, respectivamente.

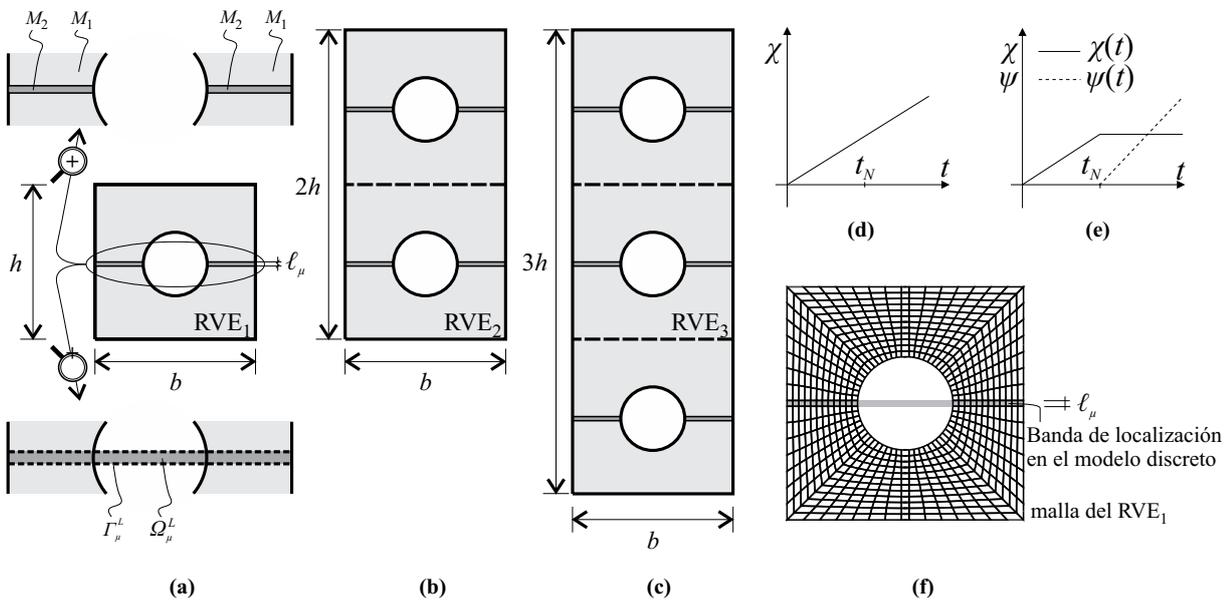


Figura 7.8: Micro estructuras con poros circulares: (a) RVE₁ (720 elementos finitos en el modelo discreto), (b) RVE₂ (1440 elementos finitos en el modelo discreto), (c) RVE₃ (2160 elementos finitos en el modelo discreto), (d) Función $\chi(t)$ utilizada para el modelo MMCI, (e) Función $\chi(t)$ y función $\psi(t)$ utilizada para el modelo FMOF, (f) Discretización por elementos finitos para el RVE₁.

Los ángulos $\Lambda = 90^\circ$, $\Theta = \beta = 0^\circ$ y $\eta = 90^\circ$ (η determinado con el criterio de bifurcación, Sec. 5.4), definen el camino de deformación macro generalizada a insertar en la micro escala. Estos valores coinciden con un modo de corte puro aplicado al RVE durante toda la historia de carga. Como antes, la primer simulación numérica se basa en el modelo MMCI. Para ello se adopta un incremento monótono de la deformación regular ϵ_R , cuya magnitud se controla con el coeficiente $d\chi = 2e-5 \forall t$, ver Fig. 7.8-d y Ec. (7.1). En la Fig. 7.9-a se visualiza la curva de respuesta tensión-deformación homogeneizada: σ_{xy}

	$E_\mu [F/L^2]$	ν_μ	$\sigma_{Y\mu} [F/L^2]$	$G_{F\mu} [F/L]$	$\ell_{ch} [L]$
Material: M_1	2.1e5	0.3	—	—	—
Material: M_2	2.0e4	0.3	42e1	5.25	4.54

Tabla 7.4: Propiedades materiales para las micro estructuras mostradas en la Figura 7.8

vs. ε_{Rxy} . El punto B se corresponde con el tiempo de bifurcación macro. Nuevamente, el modelo MMCI manifiesta una respuesta objetiva, en relación al tamaño del RVE, sólo para el tramo $A-B$. Al sobrepasar el punto crítico B la respuesta macroscópica se torna extremadamente sensible al tamaño micro estructural adoptado, véase las curvas $B-C_1$, $B-C_2$ y $B-C_3$ en la misma Figura.

Considere ahora los resultados obtenidos con la formulación FMOF. En este caso la historia de deformación macro a aplicar está caracterizada por: $d\chi = 2e-5$ para $t \leq t_N$, $d\chi = 0$ para $t > t_N$ y $d\psi = 6e-4$ para $t > t_N$, ver la definición esquemática de la función $\chi(t)$ y $\psi(t)$ en la Fig. 7.8-e como también la Ec. (7.2). La Fig. 7.9-b muestra la relación cohesiva homogeneizada asociada a la fisura macro en términos de las componentes T_x vs. β_x . Note una vez más que se obtiene una solución físicamente admisible, con energía de fractura objetiva, para los 3 RVEs analizados, como se aprecia en el tramo $B-D$ de la misma Figura.

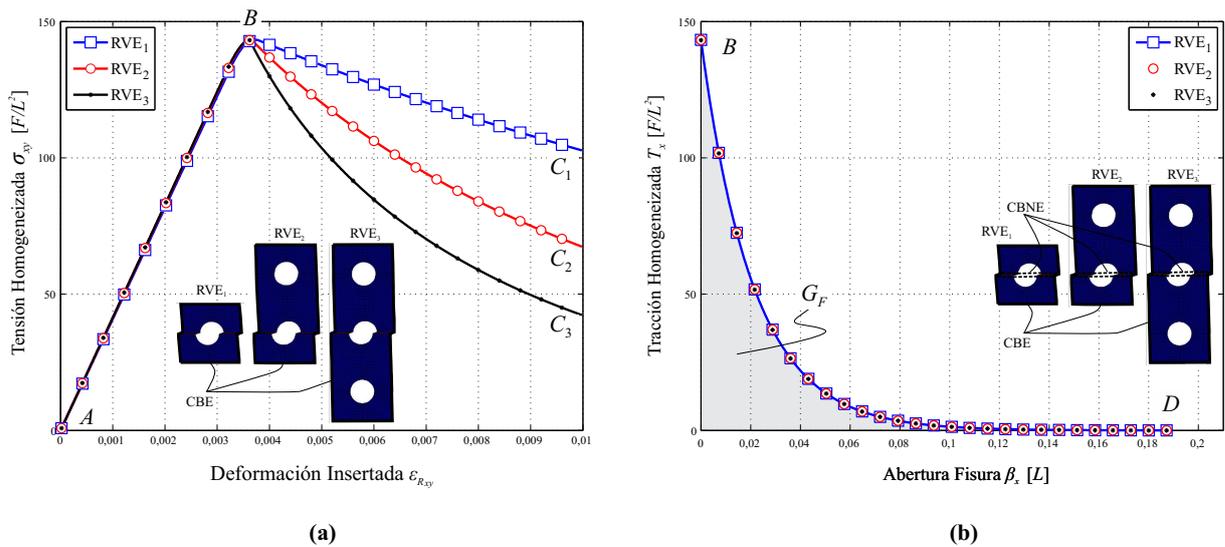


Figura 7.9: Respuesta homogeneizada para microestructuras porosas con bandas de localización horizontales: (a) Relación σ_{xy} vs. ε_{Rxy} obtenida usando la técnica *MMCI*, (b) Relación T_x vs. β_x obtenida usando la aproximación *MMCo*, para $t > t_N$.

La topología del sub-dominio micro con localización de deformaciones, Ω_μ^L , puede observarse en la Fig. 7.8-a. Este sub-dominio se determina según la metodología discutida en la Sec. 4.8. Note que Ω_μ^L incluye parte del poro. Observe también que la técnica propuesta para la identificación de Ω_μ^L asegura: (i) una respuesta constitutiva objetiva durante el régimen post-crítico material y (ii) continuidad de tracciones entre el modelo *MMCI* y el modelo *MMCo*, para el tiempo de nucleación $t = t_N$, tal como se advierte al comparar los niveles tensionales en los puntos etiquetados con la letra B en las Figs. 7.9-a y 7.9-b respectivamente. Lograr una transición suave (continua), al pasar del modelo *MMCI* al modelo *MMCo*, en el punto B ($t = t_N$), es una propiedad fundamental de nuestra formulación que ciertamente representa la física esperable del material. No obstante, algunos modelos multiescalas recientemente propuestos en la literatura no comparten este importante atributo, véase por ejemplo Nguyen et al. (2010).

7.5. Respuesta cohesiva homogeneizada en un proceso de carga y descarga

A continuación, se evalúa la repuesta homogeneizada en régimen poscrítico ($t > t_N$) para condiciones de deformaciones macro impuestas que representan un proceso mecánico de carga-descarga en la fisura cohesiva macro. Para este propósito, se retoma el ejemplo presentado en la Sec. 7.2.2 (microestructuras con bandas de localización homogéneas e inclinadas, denominado caso (b) en el texto), en particular aquel definido mediante un modelo de daño con ablandamiento exponencial.

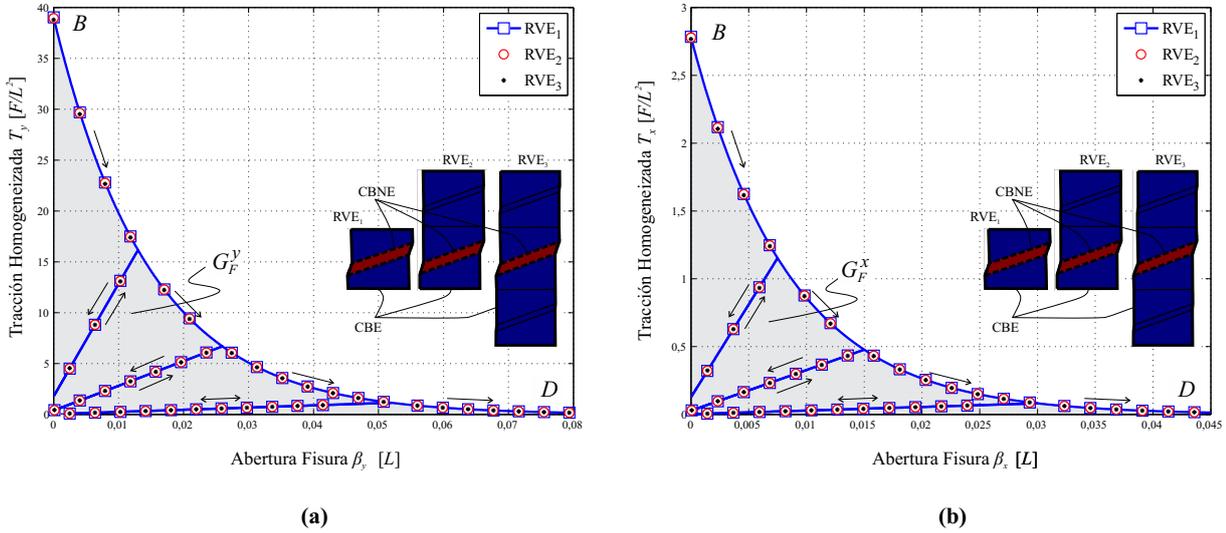


Figura 7.10: Micro estructuras con bandas de localización inclinadas, sujetas a un proceso de carga-descarga. Respuesta cohesiva homogeneizada obtenida con el modelo MMCo, para $t > t_N$: (a) Relación T_y - β_y , (b) Relación T_x - β_x .

Luego de sobrepasar el tiempo de nucleación ($t > t_N$), la historia de deformación macro aplicada a los RVEs consiste en: (i) remover prácticamente en forma instantánea la deformación regular ϵ_R , simulando así una descarga repentina de la componente continua de la cinemática macro y (ii) controlar el mecanismo de inserción de la deformación generalizada, $\mathcal{I}_y^L(d\psi d\beta)$, a través de la definición del coeficiente $d\psi = 1,5e-4$, modelando tres procesos de carga/descarga consecutivos mediante un cambio alternado del signo de $d\psi$.

La Fig. 7.10 muestra la respuesta cohesiva macro obtenida con el modelo MMCo. Las curvas constitutivas homogeneizadas, tracción vs. apertura de fisura, se presentan para las dos componentes cartesianas. Observe que la fenomenología básica subyacente del modelo de daño definido a nivel micro, se hereda en la respuesta macro homogeneizada. En este sentido, cada proceso de carga/descarga se caracteriza por un comportamiento elástico con degradación notable de rigidez el cual está directamente relacionado con el nivel de daño que tiene lugar en las bandas con localización de deformaciones micro.

Analizando los resultados para los tres RVEs tomados en consideración (RVE₁, RVE₂ y RVE₃), se observa claramente que el modelo MMCo provee una respuesta cohesiva homogeneizada independiente del tamaño micro estructural, tanto para el régimen de carga como para el de descarga. Por ende, la energía de fractura obtenida $G_F (= G_F^y + G_F^x)$ es objetiva, coincidiendo nuevamente con la propiedad material, $G_{F\mu}$, asignada al modelo de daño del material M_2 , en la escala micro.

7.6. Micro estructura periódica porosa: aplicación de diversos submodelos multiescala

En el último ejemplo numérico de este capítulo se realiza un estudio detallado de diferentes submodelos multiescala construidos a partir de distintas restricciones cinemáticas sobre las microceldas consideradas. El objetivo es analizar la capacidad que poseen cada uno de estos submodelos multiescala en cuanto a la captura de modos de falla y su correspondiente respuesta cohesiva homogeneizada, para un

problema macro que posee micro estructura heterogénea. Además, este ejemplo nos permite representar la evolución del proceso de carga post-crítica hasta la degradación completa del RVE, hecho que se manifiesta en una fuerza cohesiva homogeneizada nula, para un salto de desplazamiento dado.

7.6.1. Descripción microestructural

El problema propuesto corresponde a un material heterogéneo que posee una microestructura caracterizada por una distribución periódica de poros, tal como se observa en la Fig. 7.11-a. La línea de periodicidad de micro vacíos forma un ángulo $\alpha = 30^\circ$ con la dirección horizontal. A lo largo de esta línea la distancia entre los poros es la menor. El parámetro restante que completa la definición topológica microestructural es la mínima distancia entre poros, denominada h en el gráfico. La Fig. 7.11-a muestra además dos microceldas, la primera de ellas posee una altura $H = 4h$ (denominada RVE_{1x1}) y la otra tiene una altura $H = 8h$ (denotada como RVE_{1x2}).

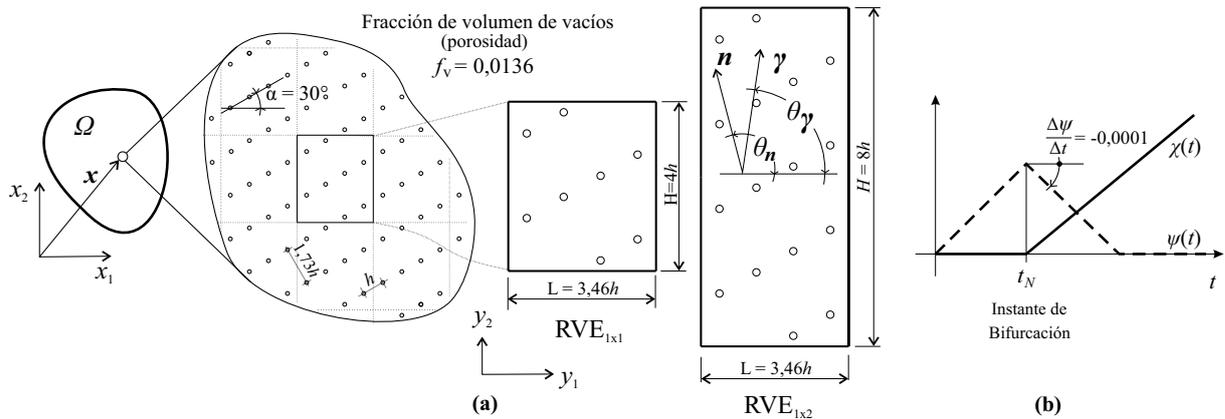


Figura 7.11: Microestructura periódica porosa: (a) Definiciones geométricas, (b) Funciones $\psi(t)$ y $\chi(t)$ que definen la historia de deformación macro aplicada

El material que constituye la matriz en la microestructura está caracterizado por un modelo de daño isótropo con ablandamiento exponencial (véase Oliver (2000) y Huespe y Oliver (2011) para una descripción detallada de esta ley fenomenológica). Los parámetros que definen el modelo son los siguientes: Módulo de Young $E_\mu = 30e6$ [F/L²], coeficiente de Poisson $\nu_\mu = 0,3$, tensión última uniaxial $\sigma_{u\mu} = 2,5e3$ [F/L²] y energía de fractura $G_{F\mu} = 10$ [F/L]. El módulo de ablandamiento inicial se regulariza en términos de la energía de fractura y el tamaño del elemento finito que compone al zona de falla micro, véase Tabla 7.1.

Una característica importante de este ejemplo, que se diferencia de los anteriores, es que la microestructura considerada puede sufrir degradación, daño y localización de deformaciones en cualquier punto del dominio Ω_μ del RVE. Es decir, el mecanismo de falla micro no se pre-induce como se hizo previamente sino por el contrario, éste propaga por donde la física del problema micro, regulada por la historia de deformaciones macro impuestas, lo exige. Esta situación representa un aspecto clave que la formulación multiescala propuesta debe poder modelar en forma satisfactoria dado que, muy probablemente, caracteriza la condición real de un material heterogéneo compuesto por una matriz con inclusiones (poros en este caso).

7.6.2. Condiciones de carga en las microceldas (deformaciones macro impuestas)

Inicialmente, antes de detectar la bifurcación a nivel macro ($t < t_N$), la celda unitaria se modela mediante la aproximación MMCI. La misma está sujeta a un historia de deformación uniaxial vertical. El incremento de deformación macro regular viene definido por los parámetros $\Lambda = \Theta = 90^\circ$ (ver Ec. (7.1)), es decir adquiere la forma:

$$d\boldsymbol{\varepsilon}_R = d\psi(t) \boldsymbol{\Lambda}(\Lambda) \otimes^s \boldsymbol{\Theta}(\Theta) = \begin{bmatrix} d\varepsilon_{Rxx}(t) & d\varepsilon_{Rxy}(t) \\ d\varepsilon_{Ryx}(t) & d\varepsilon_{Ryy}(t) \end{bmatrix} = d\psi(t) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (7.3)$$

donde se adopta un coeficiente incremental $d\psi$ constante durante el intervalo $t \in [0, t_N]$, es decir una función $\psi(t)$ (y por ende la componente axial vertical de la deformación) creciente en forma monótona hasta $t = t_N$, observe la Fig. 7.11-b).

Una vez que se ha detectado el tiempo de bifurcación ($t = t_N$), se activa una fisura cohesiva macro y la cinemática insertada en el RVE se modifica según lo establece el modelo MMCo. En este contexto, el incremento de deformación macroscópica, compatible con un modo localizado, viene dada por:

$$d\boldsymbol{\varepsilon} = d\boldsymbol{\varepsilon}_R + \mathcal{I}_y^L(d\chi(t) d\boldsymbol{\beta}) \quad (7.4)$$

donde $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$ se corresponde con la contraparte regular de la deformación insertada, definida en forma idéntica a lo presentado en el párrafo previo Ec. (7.3), pero siguiendo un camino de descarga, es decir con una función $\psi(t)$ decreciendo hacia cero (se cambia el signo del coeficiente incremental $d\psi$), ver Fig. 7.11-b). Por otro lado, $\mathcal{I}_y^L(d\chi(t) d\boldsymbol{\beta})$ tipifica el término relacionado con el salto de desplazamiento en la fisura macro:

$$\mathcal{I}_y^L(d\chi(t) d\boldsymbol{\beta}) = d\chi(t) \frac{d\boldsymbol{\beta} \otimes^s \mathbf{n}}{\ell_\mu} \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \quad (7.5)$$

donde el coeficiente $d\chi$ (constante) caracteriza un crecimiento monótono de la magnitud del modo localizado, ver Fig. 7.11-b) a partir del tiempo de nucleación $t = t_N$. Los vectores $\mathbf{n}(\theta_n)$ y $d\boldsymbol{\beta}(\theta_\gamma)$ son los autovectores del tensor de localización determinados al tiempo de bifurcación, según el criterio descrito en la Sec. 5.4³. En particular, el vector \mathbf{n} representa la dirección normal a la superficie de discontinuidad en la macro escala, la cual coincide, casi exactamente, con la normal a la banda de falla micro \mathbf{n}_μ (ver los resultados presentados en la Fig. 7.12-a) de la Sección siguiente: $\theta_n \approx -64,8^\circ$ y $\theta_\gamma \approx 75,1^\circ$.

Recuerde que el incremento de deformación regular, $d\boldsymbol{\varepsilon}_R$, se inserta en forma homogénea en el dominio del RVE mientras que $\mathcal{I}_y^L(d\chi(t) d\boldsymbol{\beta})$ se inserta sólo en donde la deformación localiza a nivel micro (Ω_μ^L), debido a la presencia de la función de colocación $\phi_\mu^L(\mathbf{y})$ en la Ec. (7.5) (ver Sec. 4.2).

7.6.3. Análisis del modo de deformación localizado obtenido con diferentes submodelos multiescala (MMCI)

Debido a que la microestructura es periódica, la microcelda identificada como $\text{RVE}_{1 \times 1}$ con condiciones de borde periódicas satisface naturalmente el criterio de representatividad, al menos durante la etapa de comportamiento estable del material. Sin embargo, la misma microcelda con mínima restricción cinemática o bien con condiciones lineales, puede no satisfacer dicho criterio y, por ende, no tener el tamaño suficiente para considerarse un RVE.

Primeramente se analiza el modo de localización de deformaciones obtenido utilizando el modelo MMCI aplicado al $\text{RVE}_{1 \times 1}$, con condiciones de borde periódicas. Dicho modo de falla viene caracterizado por los siguientes parámetros: los ángulos θ_n y θ_γ , el tiempo de bifurcación o nucleación t_N y el valor de la tensión homogeneizada σ en t_N . Por lo comentado en el párrafo anterior, la solución $\{\theta_n, \theta_\gamma, t_N, \sigma\}$ obtenida bajo estas circunstancias se considera como la *solución exacta* al problema, la cual será comparada con los resultados derivados de utilizar diferentes microceldas de tamaño creciente y sujetas a restricción cinemática mínima y condiciones de borde lineales (ver Secs. 3.10 y 6.1.2), para estimar cuál es el tamaño representativo que provee soluciones similares al submodelo periódico. Para comprobar la hipótesis que las microceldas elegidas con condiciones de borde periódica, desde la celda unitaria básica ($\text{RVE}_{1 \times 1}$), son representativas, aún usando materiales con ablandamiento en la microescala, también se realiza la resolución de varios tamaños de celda con este tipo de condición borde.

La condición de pérdida de estabilidad material (a nivel macro) se verifica en cada instante de la simulación. En la Fig. 7.12-a) se muestra la evolución de la función $\det(\mathbf{Q})$ (Ec. (2.22)) para diferentes

³Según lo discutido en la Sec. 5.4, los dos autovectores del tensor de localización homogeneizado \mathbf{Q} , al instante de bifurcación t_N , representan físicamente la dirección normal a la fisura macro (\mathbf{n}) y la dirección de “velocidad” de apertura inicial de fisura, denotada como $d\boldsymbol{\gamma}$. En este ejemplo se asume que $d\boldsymbol{\beta} \equiv d\boldsymbol{\gamma}$ (o equivalentemente $\theta_\beta = \theta_\gamma$, siendo θ_γ el ángulo del vector $d\boldsymbol{\gamma}$ forma con las abscisas) a largo de todo el intervalo $[t_N, t_F]$. Esto quiere decir que la dirección de apertura *impuesta* a la microcelda ($d\boldsymbol{\beta}$) coincide con la dirección de velocidad inicial ($d\boldsymbol{\gamma}$).

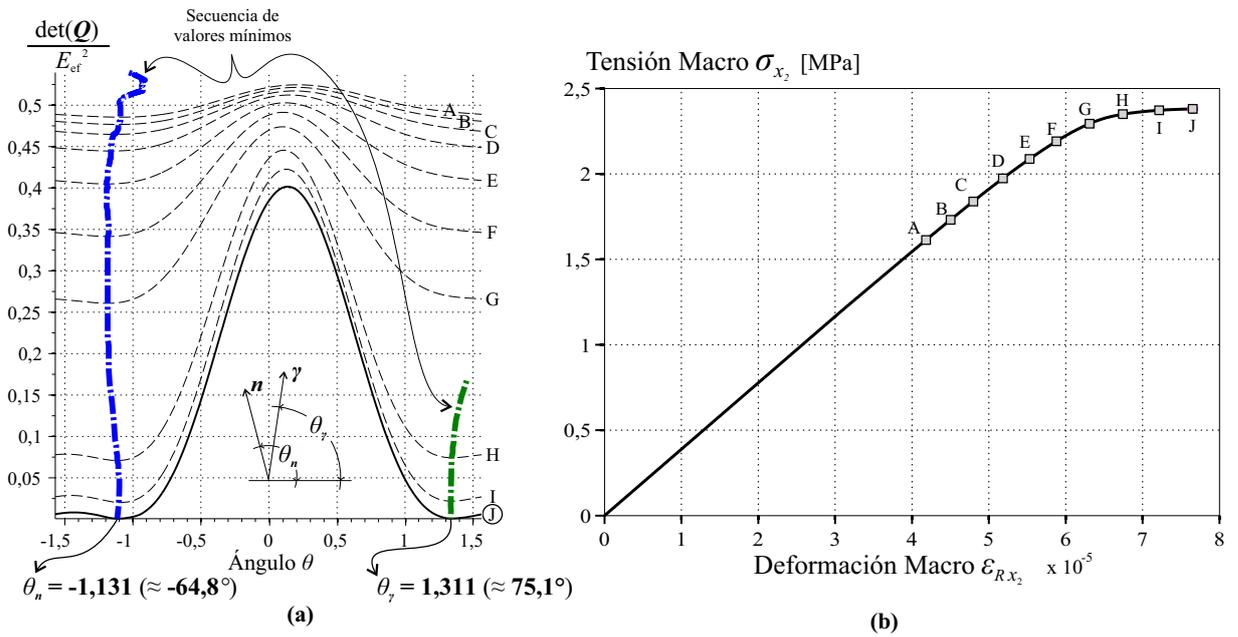


Figura 7.12: Micro estructura periódica porosa: (a) Evolución de $\det(\mathbf{Q})$ para el $\text{RVE}_{1 \times 1}$ con condiciones de borde periódicas, (b) Relación tensión-deformación homogeneizada. Las letras en el gráfico identifican los instantes de tiempo donde se ha evaluado la función $\det(\mathbf{Q}(n, t))$.

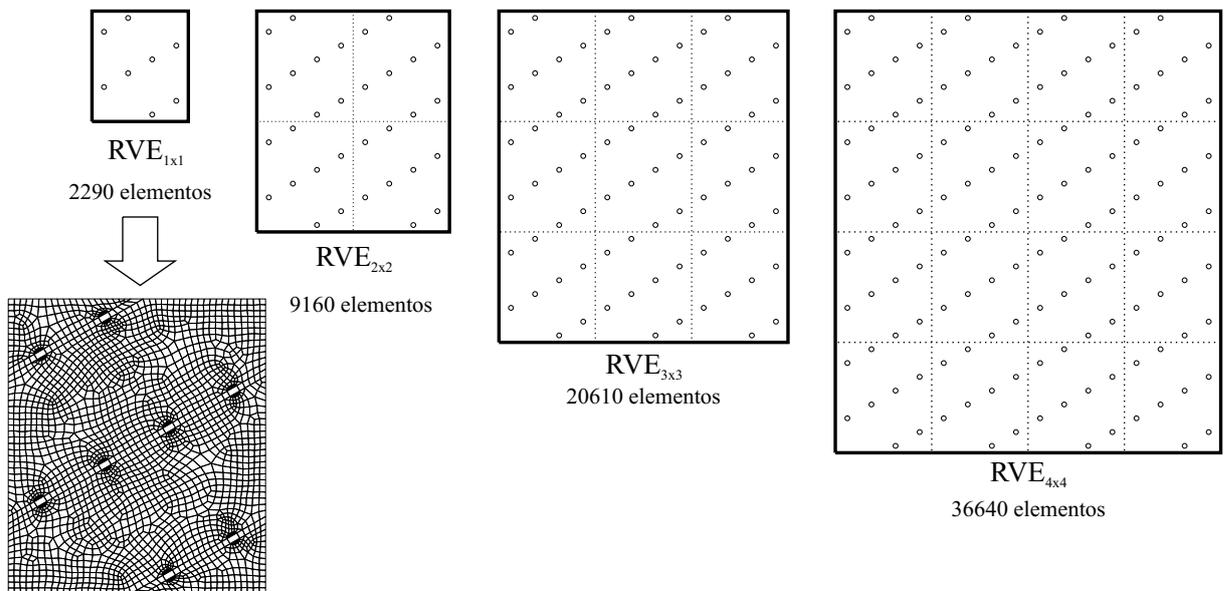


Figura 7.13: Micro estructura periódica porosa: secuencia de RVEs para analizar los modos de localización obtenidos utilizando condiciones de mínima restricción o lineal.

estados durante la historia de carga. El valor del determinante está normalizado con el cuadrado del módulo de elasticidad efectivo estimado como: $E_{ef} = (1 - f_v) E_\mu$, siendo f_v la fracción en volumen de vacíos con respecto al volumen total (porosidad: $f_v = |\Omega_\mu^{vacíos}|/|\Omega_\mu|$) y E_μ el módulo de elasticidad de la matriz material. Se recuerda que estos resultados han sido obtenidos para el RVE $_{1 \times 1}$. En la misma Figura se observa la evolución de los dos valores mínimos de $\det(\mathbf{Q})$. El tiempo de bifurcación, t_N , corresponde al instante para el cual la curva $\det(\mathbf{Q})$ interseca por primera vez el eje de abscisas (Sec. 5.4), ver en particular la curva J. Las dos soluciones admisibles están identificadas con los ángulos θ_n y θ_γ que definen los dos autovectores \mathbf{n} y $d\boldsymbol{\beta}$ del tensor acústico, respectivamente.

Observe que para la condición de carga estudiada en el presente ejemplo, el ángulo θ_n define un vector \mathbf{n} que resulta prácticamente ortogonal a la línea sobre la cual la distancia entre poros es menor, caracterizando una fisura macro que es paralela a dicha dirección. Esta solución se obtiene en forma natural sin imponer a-priori ningún camino preferencial de deformación a nivel micro.

Seguidamente, se analiza los modos de deformación que se obtienen utilizando el modelo MMCI aplicado a una secuencia de microceldas denominadas RVE $_{1 \times 1}$, RVE $_{2 \times 2}$, RVE $_{3 \times 3}$, RVE $_{4 \times 4}$, ver Fig. 7.13. Estas microceldas se construyen mediante una simple repetición horizontal y/o vertical del RVE $_{1 \times 1}$. Las condiciones de borde se corresponden al submodelo de mínima restricción o lineal.

Los modos de bifurcación obtenidos con las cuatro secuencias de microceldas se presentan en la Tabla 7.5, en términos de las siguientes variables: (i) el tiempo de bifurcación t_N , (ii) los ángulos θ_n y θ_γ y (iii) los valores de tensión y deformación homogeneizada, σ_{x_2} y ε_{Rx_2} , al tiempo $t = t_N$.

Submodelo MMCI	Microcelda	t_N	σ_{x_2} [1e3 F/L ²] (para $t = t_N$)	ε_{Rx_2} (para $t = t_N$)	θ_n [°]	θ_γ [°]
Condiciones de borde Periódicas	RVE $_{1 \times 1}$	0,766	2,380	7,65e-5	-64,8	75,1
	RVE $_{2 \times 2}$	0,766	2,380	7,65e-5	-64,8	75,1
	RVE $_{3 \times 3}$	0,766	2,380	7,65e-5	-64,8	75,1
Condiciones de borde de Mínima Restricción	RVE $_{1 \times 1}$	0,694	2,346	6,93e-5	-70,2	75,6
	RVE $_{2 \times 2}$	0,694	2,354	6,93e-5	-69,3	76,0
	RVE $_{3 \times 3}$	0,704	2,359	7,03e-5	-68,0	75,6
	RVE $_{4 \times 4}$	0,705	2,361	7,04e-5	-67,9	76,0
Condiciones de borde Lineales	RVE $_{1 \times 1}$	0,890	2,492	8,99e-5	-68,4	81,0
	RVE $_{2 \times 2}$	0,801	2,425	8,00e-5	-65,2	77,4
	RVE $_{3 \times 3}$	0,770	2,405	7,69e-5	-64,8	76,0
	RVE $_{4 \times 4}$	0,757	2,396	7,56e-5	-64,8	75,6

Tabla 7.5: Modos de deformación localizado obtenidos utilizando la aproximación MMCI considerando diferentes submodelos multiescala ($t < t_N$).

La Fig. 7.14-a muestra un zoom, próximo al instante $t = t_N$, de la curva tensión-deformación homogeneizada en la componente “ x_2 ” (σ_{x_2} vs. ε_{Rx_2}) para el submodelo con condiciones de borde lineales. Estas respuestas se comparan con la solución obtenida utilizando el submodelo periódico. Además, en la Fig. 7.14-b se observa un gráfico cuya abscisa representa el logaritmo del tamaño de la microcelda considerada y la ordenada, el logaritmo del error en la tensión homogeneizada, al tiempo t_N , obtenido como:

$$e = \frac{\|\sigma^*(t_N) - \sigma^P(t_N)\|}{\|\sigma^P(t_N)\|} \quad (7.6)$$

donde $\sigma^*(t_N)$ denota el nivel de tensión al tiempo de bifurcación evaluado con el submodelo de mínima restricción cinemática o lineal y $\sigma^P(t_N)$ simboliza la misma tensión obtenida con el submodelo periódico.

Como puede observarse a partir de la Tabla 7.5 y la Fig. 7.14, en todos los casos, las secuencias de valores de tensión alcanzados en $t = t_N$ tienden hacia la solución dada por el submodelo periódico, a medida que aumenta el tamaño del RVE. El submodelo con condiciones de borde lineales posee una tasa de convergencia superior, véase la Fig. 7.14-b. Los ángulos θ_n y θ_γ muestran una tendencia correcta

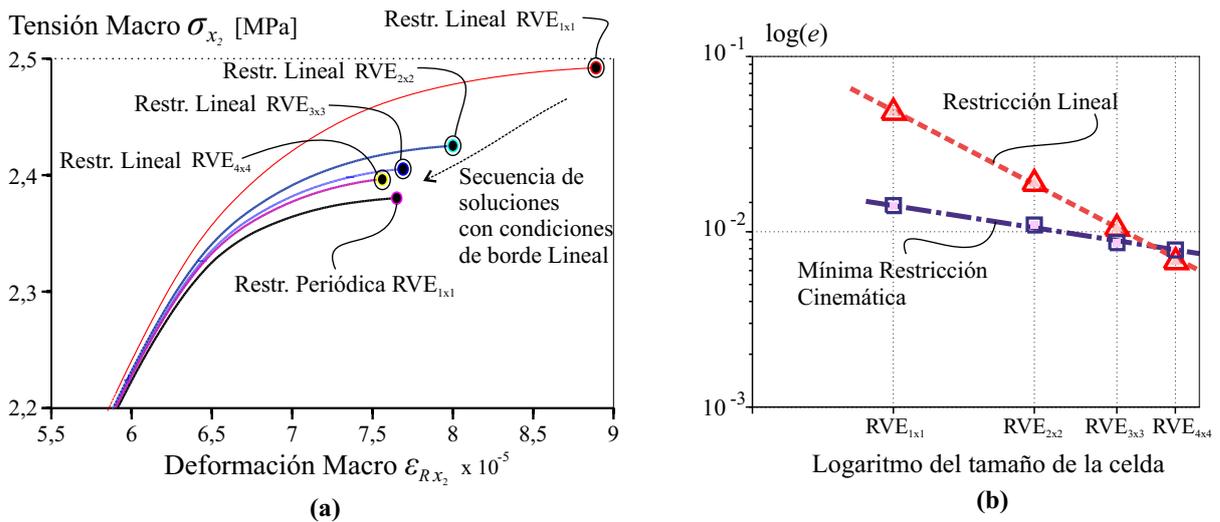


Figura 7.14: Micro estructura periódica porosa: (a) Curvas de respuesta homogeneizada σ_{x_2} vs. $\varepsilon_{R_{x_2}}$ para el submodelo multiescala lineal y comparativa frente a la solución periódica obtenida para el RVE_{1x1} (el punto final de cada curva representa el instante de bifurcación t_N); (b) Gráfico de error asociado a la tensión de bifurcación valuada en t_N para el submodelo lineal y submodelo de mínima restricción cinemática versus tamaño de las microceldas.

sólo en aquellos casos correspondientes al submodelo lineal. No obstante, las soluciones para $\{\theta_n, \theta_\gamma\}$ dadas por la secuencia de tamaños de RVE obtenida utilizando el submodelo con Mínima Restricción Cinemática, muestra valores límites que son algo diferentes. El argumento que se utiliza para explicar esta inconsistencia se fundamenta en que cuando se usa un modelo de mínima restricción cinemática la topología microestructural debe modificarse levemente con el fin de evitar que los poros alcancen o se aproximen demasiado a la frontera del RVE (el cual por definición posee tracción uniforme), dado que esta situación induce respuestas inconsistentes o caminos preferenciales de deformación muy marcados. En los ejemplos presentados aquí, para el caso del submodelo mínimamente restringido, se inhabilitó la localización en los poros muy próximos a la frontera y sobre las líneas de falla probables más cortas, rodeándolos de material elástico (esta técnica evita el daño del material circundante).

Con el análisis presente es posible obtener una estimación confiable en cuanto al tamaño mínimo que se requiere para modelar una microestructura y que ésta pueda ser considerada como estadísticamente representativa (es decir un RVE). En [Pindera et al. \(2009\)](#) se propuso un estudio similar para determinar el tamaño de RVE por medio de un análisis de convergencia. Allí se han utilizado diversas microceldas con condiciones de borde lineales y de mínima restricción. Sin embargo, dicho estudio se restringe sólo a materiales heterogéneos elásticos con microestructuras periódicas, mientras que en el presente trabajo se ha extendido la discusión, incorporando en el análisis fenómenos de degradación y falla micro.

7.6.4. Análisis de objetividad de la respuesta durante el régimen inestable material utilizando el modelo MMCo

En esta Subsección, se presentan los resultados obtenidos sobre el análisis de objetividad considerando las microceldas mostradas en Fig. [7.11-a](#). Según lo explicado en la Sec. [7.6.3](#), se asume que en la etapa estable macro las microceldas elegidas son suficientes representativas bajo condiciones de borde periódicas. Se verifica ahora si las repuestas homogeneizadas resultan independientes del tamaño del RVE durante la etapa inestable ($t > t_N$) al utilizar, en este período, el modelo MMCo propuesto.

La historia de deformaciones macro aplicada es aquella descrita en la Sec. [7.6.2](#). Luego de detectar bifurcación, la cinemática generalizada se inyecta en la microcelda tal como lo estipula el modelo MMCo (Cap. [4](#)), y las condiciones de borde son modificadas en consecuencia.

Para resolución del problema actual se propone una metodología que puede utilizarse como estrategia general para acelerar la detección numérica del dominio de localización. En la misma se aprovecha el tratamiento numérico generalizado de las condiciones de borde desarrollado y explicado en la Sec. [6.1.3](#).

En los párrafos siguientes se detalla esta metodología.

Como ya fue explicado anteriormente, la elección de las condiciones de borde estándar (CBE, Sec. 4.3) define el submodelo MMCI adoptado durante la respuesta estable del material. Por ejemplo pueden seleccionarse los submodelos de Mínima Restricción Cinemática, Periodicidad, como indicado en las Figs. 7.15-b) y 7.15-c), u otra condición de borde (Lineal, etc.; ver Sec. 3.10).

A partir de la bifurcación macro ($t > t_N$), se realiza el cambio del modelo MMCI al esquema MMCo (Sec. 2.6). Para ello, el subdominio de localización Ω_μ^L (esquemático en la Fig. 7.15-d) debe estar claramente identificado. Luego, será posible prescribir las condiciones de borde no estándar (CBNE) sobre la frontera Γ_μ^L y realizar la inserción del incremento macro generalizado $\mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta})$ (ver Ec. 4.2) y Sec. 4.2).

Una técnica numérica que permite determinar el Ω_μ^L e introducir las CBNE, ya que acelera el proceso de localización de deformaciones en la microescala, consiste en los dos pasos secuenciales que se describen continuación:

(i) Primer paso, una vez detectada la bifurcación macro ($t = t_N$):

Sin importar que tipo de submodelo ha sido definido durante la etapa estable, para $t = t_N$ se modifican las CBE por condiciones de borde periódicas generalizadas sobre Γ_μ , teniendo la periodicidad una dirección perpendicular al vector normal \mathbf{n} , o en forma equivalente, paralela a la superficie de discontinuidad en la macroescala. Esta técnica fue derivada de las ideas propuestas en el trabajo de Coenen et al. (2012b), donde se proponen restricciones cinemáticas similares (en dicho trabajo se denominan condiciones de borde del tipo *percolation-path-aligned*). Las condiciones de periodicidad inclinada adoptadas son esquematizadas en la Fig. 7.15-c) y son prescriptas en el problema numérico incorporando el sistema de ecuaciones indicado en la Ec. 6.11).

Junto con estas condiciones de borde se incorporan además, sobre Γ_μ , condiciones de tipo Mínima Restricción Cinemática (Ec. 6.13). En la Fig. 7.15-c) se observa esta restricción combinada y la selección de tres grados de libertad arbitrarios dependientes (para el caso 2D), véase Sec. 6.2.1. A diferencia de las condiciones periódicas estándar, estas condiciones de borde con periodicidad inclinada no aseguran en forma intrínseca la admisibilidad cinemática macro-micro (Ec. 4.14) ó 4.16), por lo tanto se hace necesario incorporar, adicionalmente, las ecuaciones de mínima restricción indicadas.

Notar que las condiciones de borde descritas, esquematizadas en la Fig. 7.15-c), aplicadas sobre la frontera externa de la microcelda Γ_μ , constituyen un caso particular de las CBE y que se proponen en este trabajo de tesis como una herramienta para modelar falla material.

La introducción de las condiciones de borde periódicas alineadas con la fisura macro intensifica la evolución de la zona de localización de deformaciones en la microescala. De esta forma es posible determinar el subdominio de localización de manera clara, utilizando el criterio propuesto en la Sec. 4.8.

(ii) Segundo paso, un corto período de tiempo después de haber impuesto las condiciones de borde periódicas alineadas (Punto i) ($t = t_N + \Delta t$):

Detectado el subdominio Ω_μ^L , se introducen las condiciones de borde CBNE sobre la frontera Γ_μ^L . Las restricciones resultantes son aquellas indicadas en las Figs. 7.15-c) y 7.15-d). En concordancia con el modelo MMCo se inserta el camino de deformación indicado en la Ec. 7.4). Observe que este mecanismo de inserción resulta consistente con el operador $\mathcal{I}_y^*(d\boldsymbol{\varepsilon}_R, d\boldsymbol{\beta})$ del esquema MMCo.

Para este ejemplo particular con poros, se pueden adoptar como CBNE los submodelos de Taylor o Lineal, ya que permiten modelar casos donde el Ω_μ^L interseca poros internos, como los indicados en la Fig. 7.15-d).

Para el ejemplo presente, se adoptaron dos microceldas denominadas como: RVE_{1x1} y RVE_{1x2}. La geometría y malla de elementos finitos utilizada se muestran en la Fig. 7.16). Para facilitar la determinación del dominio de localización Ω_μ^L , la superficie de los poros es mallada. Los mismos se caracterizan con

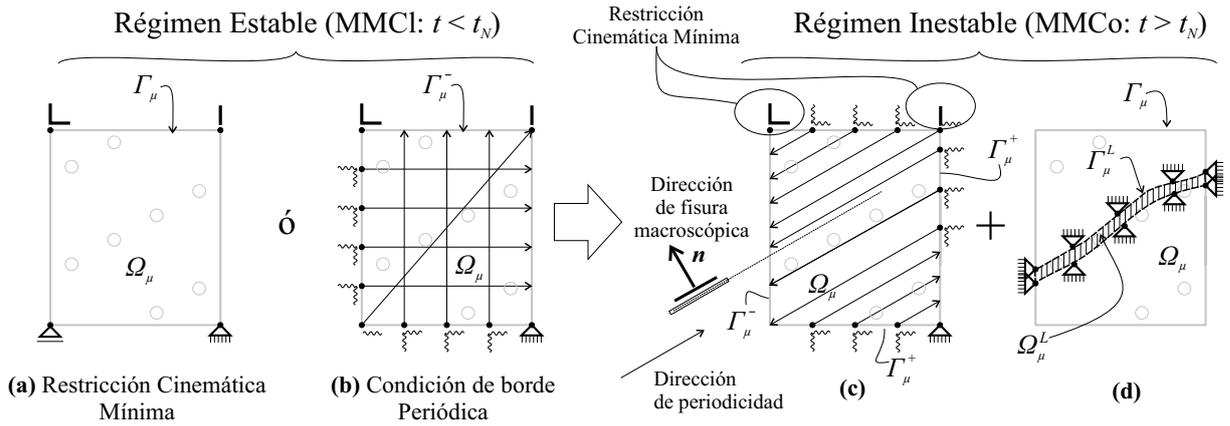


Figura 7.15: Submodelos multiescala para análisis de problemas de falla. Condiciones de borde (se utiliza la misma simbología aplicada en la Sec. 6.1) sobre el campo de desplazamientos fluctuantes en la microescala. (a) Submodelo de mínima restricción para la etapa estable material, (b) Submodelo periódico clásico para la etapa estable material, (c) Condiciones periódicas generalizadas alineadas con la dirección de falla macro, (d) Condiciones de borde no estándar (CBNE) propias del modelo MMC0.

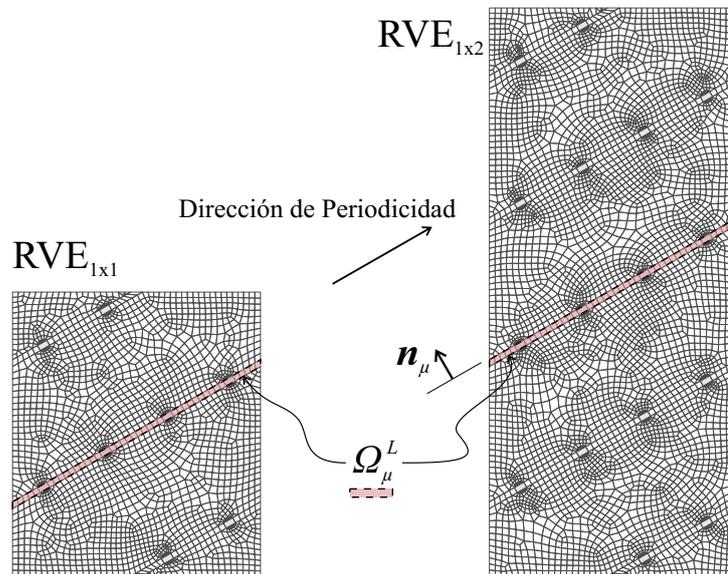


Figura 7.16: Malla de elementos finitos para las microceldas denotadas como RVE_{1x1} y RVE_{1x2} . Subdominios de localización Ω_μ^L para ambos casos.

un material elástico con módulo de elasticidad $E_\mu \approx 0$ (el material de la matriz es el descrito en la Sec. 7.6.1). El subdominio de localización también se indica en la Fig. 7.16.

Se sigue la metodología discutida en los Puntos i) y ii) previos, considerando condiciones de borde de tipo periódica convencional, hasta alcanzar la bifurcación ($t < t_N$). Para el régimen inestable se adiciona una CBNE de tipo lineal (sobre Γ_μ^L).

En la Fig. 7.17 se muestra el mapa de daño en la configuración deformada (asociada al campo de desplazamiento fluctuantes \tilde{u}_μ), para ambas celdas y para dos estados distintos: en el instante de bifurcación, t_N , y en el final del análisis, (t_F).

Como se observa en la Fig. 7.17 el nivel de daño alcanzado hasta el instante de bifurcación ($t = t_N$) es alto y distribuido en diferentes zonas de la microcelda (principalmente alrededor de los poros). Se remarca que esta evolución y distribución de la variable de daño, hasta alcanzar inestabilidad macro, define, en la misma etapa de análisis, la respuesta constitutiva homogeneizada no lineal en la macroescala (ver Fig. 7.12-b) y la (macro) disipación estable de energía.

La Fig. 7.18 muestra la curva de respuesta en términos de las componentes normales y tangenciales

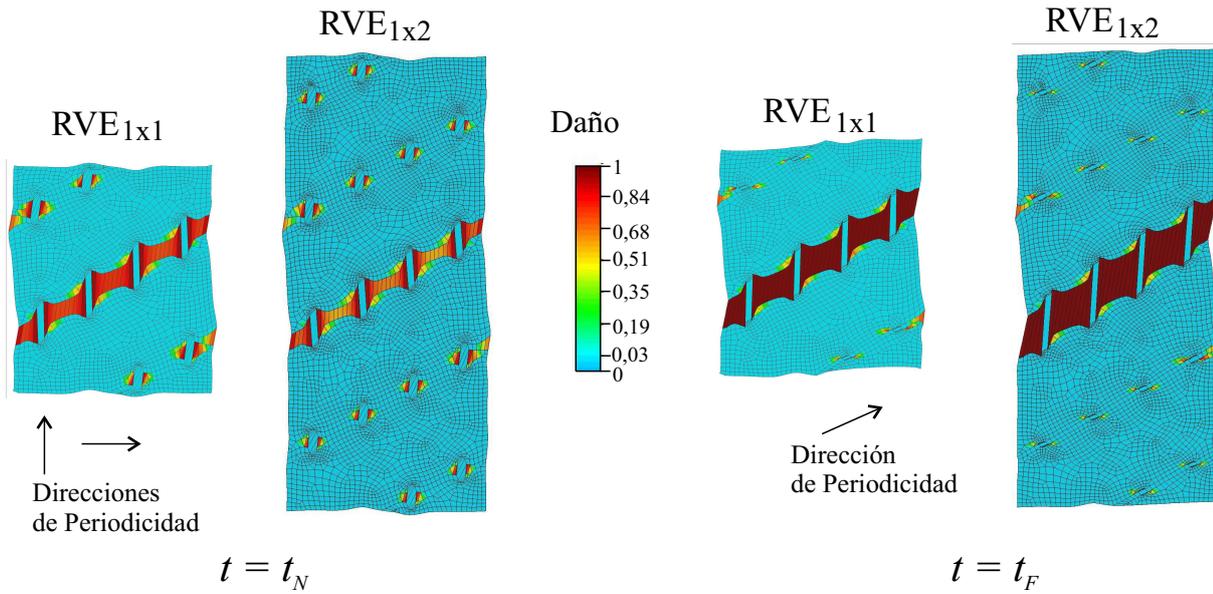


Figura 7.17: Análisis de fractura con microcelda porosa. Malla deformadas y distribución de daño de las microceldas $RVE_{1 \times 1}$ y $RVE_{1 \times 2}$, en dos etapas de análisis.

del vector tracción homogeneizado (\mathbf{T}) y salto macro (β). La denominación normal y tangencial hace referencia a las componentes según la orientación de la fisura macro. Durante el régimen poscrítico, el vector \mathbf{T} se determina utilizando el procedimiento dado por el modelo MMCo. En el mismo gráfico se incluyen las soluciones obtenidas para las microceldas $RVE_{1 \times 1}$ y $RVE_{1 \times 2}$, observándose claramente una respuesta homogeneizada objetiva. Se observa que las mismas coinciden, verificándose la objetividad de la respuesta material.

Notar que mediante la formulación propuesta en esta tesis (FMOF) ha sido posible capturar un modo mixto de fractura, como así también resultados físicamente consistentes.

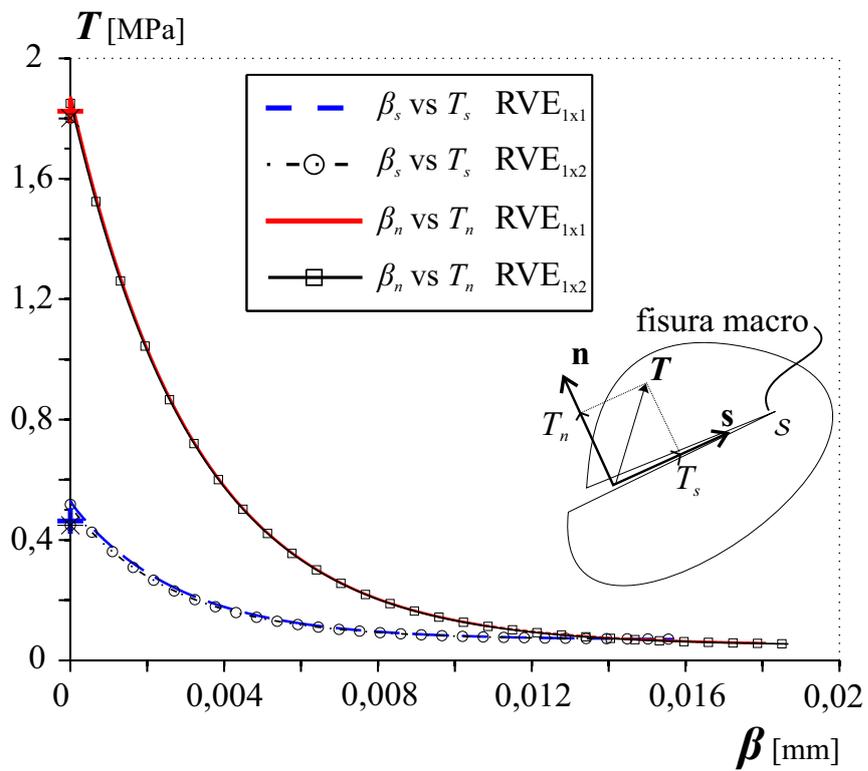


Figura 7.18: Componente normal y tangencial del vector tracción homogeneizado, T , en función del salto en desplazamiento en la macroescala β . Curvas de respuesta para el RVE_{1x1} y RVE_{1x2}.

Capítulo 8

Modelo multiescala aplicado a problemas Macro-Micro acoplados

8.1. Preliminares

A diferencia del capítulo precedente, en éste se muestra y evalúa la performance del modelo multiescala propuesto (FMOF) en forma integral. Esto implica que se presentarán ejemplos en los cuales se modelan ambas escalas de análisis, macro y micro, totalmente acopladas interactuando entre sí. En la escala macro se definen las características propias de un problema mecánico convencional como ser: geometría, condiciones de borde esenciales impuestas e historia de cargas impuestas. Desde el punto de vista de la aproximación numérica vía MEF hace falta definir además el tipo de elemento finito a utilizar, como así también un conjunto de parámetros que caracterizan el esquema de resolución no lineal macro. Advierta que en el contexto multiescala que nos ocupa, el comportamiento constitutivo del material que compone la macro estructura no se especifica en forma explícita mediante leyes de tipo fenomenológicas. Por el contrario, se asume que esta respuesta se evalúa a través de un análisis detallado realizado a una escala de longitud menor, la micro-escala heterogénea, y posterior procedimiento de homogeneización. Para ello, también hace falta definir un problema numérico a nivel micro (que comparte muchas de las características básicas del problema macro) con sus correspondiente geometría, restricciones cinemáticas y leyes constitutivas fenomenológicas micro. La excitación mecánica a nivel micro estructural se impone en forma natural gracias al acoplamiento con la macro escala, a través del proceso de inserción de deformaciones. Note entonces que en todos los casos a resolver en este capítulo, la deformación impuesta a la micro estructura no se asume arbitraria, sino por el contrario deriva de satisfacer las ecuaciones de equilibrio macroscópico.

En rigor, dentro de un entorno multiescala, cada punto de la escala macroscópica tiene asociado una microestructura heterogénea que debe ser resuelta. No obstante, por conveniencia y generalidad de modelado, nuestra implementación computacional FE² permite definir diferentes comportamientos para diferentes subdominios macro (“sets” de elementos finitos macro). En este sentido, parte del material que compone la macro estructura puede tener un comportamiento constitutivo simple de caracterizar mediante leyes fenomenológicas convencionales y, por ende, así se modela, optimizando recursos computacionales. Por otro lado, para aquellos subdominios que sí poseen una microestructura interna (la cual gobierna fuertemente su comportamiento constitutivo), se realiza el salto de escala correspondiente según nuestra propuesta.

En síntesis, a nivel macro es posible definir sets de elementos con comportamiento constitutivo fenomenológico convencional y sets de elementos finitos con comportamiento constitutivo obtenido vía un modelo multiescala. Dada la generalidad de la implementación computacional, es posible también definir sets multiescala con diferentes micro-estructuras. A pesar de las posibilidades de modelado que ofrece el código desarrollado, en esta tesis se está interesado en evaluar el desempeño de la formulación propuesta en cuanto a aspectos mecánicos fundamentales, por este motivo los ejemplos presentados a continuación están diseñados para tal finalidad, resignando complejidades innecesarias.

8.2. Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios

El ejemplo desarrollado en esta Sección es un ejemplo macro y micro acoplado, donde la macroestructura es una barra estirada axialmente en modo de tracción y la microestructura está compuesta por una matriz material que posee poros elípticos con ubicación y orientación aleatoria (Toro et al., 2013c). La intención de este ejemplo es evaluar la formulación propuesta (FMOF) en un contexto multiescala completo, donde las microceldas unitarias promueven un dominio de localización (Ω_μ^L) tortuoso. En este caso, los vectores normales a la banda de falla micro (\mathbf{n}_μ) y el espesor de la misma (ℓ_μ) varían espacialmente. El MMCo propuesto asume estas variables como dependientes de las coordenadas micro (\mathbf{y}), por lo tanto permite considerar sus efectos en la solución homogeneizada.

El objetivo fundamental de este ejemplo es, precisamente, estudiar la capacidad que posee el modelo multiescala desarrollado para capturar modos de falla complejos y tortuosos a nivel micro-estructural.

8.2.1. Descripción

En la Fig. 8.1-a se esquematiza el problema mecánico a nivel macro. El mismo consiste en una barra de material homogéneo (multiescala), simplemente apoyada en el extremo inferior, mientras que en el superior se le impone un desplazamiento prescrito vertical. Se considera la hipótesis de deformación plana para ambas escalas.

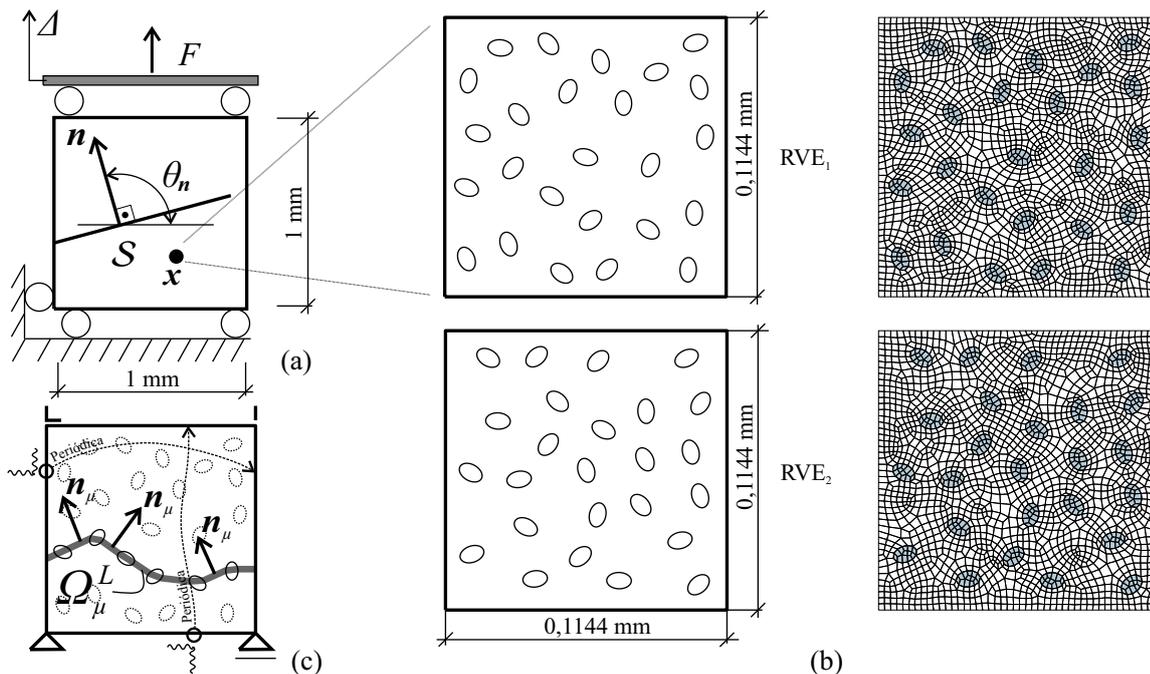


Figura 8.1: Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios. (a) Detalle del elemento estructural y variables usadas en la macroescala, junto con la fisura macro nucleada S . (b) Microceldas con poros elípticos aleatorios utilizadas y sus correspondientes mallas de elementos finitos. (c) Posible diagrama de las normales \mathbf{n}_μ , dominio localizado Ω_μ^L y esquema de condiciones de borde CBE aplicadas en la microescala.

A nivel micro se diseñaron dos microceldas cuadradas, cada una de ellas constituida por una matriz de material homogéneo e inclusiones de poros elípticos dispuestos en ubicación y dirección aleatoria (estadísticamente uniforme). Se distribuyeron un total de 25 elipses¹ iguales con un eje mayor igual a

¹La cantidad mínima de elipses se determina considerando condiciones de representatividad durante el régimen elástico (homogeneizado) del material. En particular, el criterio utilizado para garantizar dicha representatividad es la obtención de un tensor constitutivo homogeneizado con estructura suficientemente isótropa.

0,01 [mm] y una relación de ejes igual a 1,5. Las dimensiones de las microceldas se definieron de tal forma de obtener una porosidad $f_v = |\Omega_\mu^{\text{vacíos}}|/|\Omega_\mu| = 0,1$.

Observar que existe, prácticamente, una diferencia de un orden de magnitud entre las dimensiones características de la macroescala y la microescala (*salto de escala*), ver Fig. 8.1

Las condiciones de borde que se aplican a las microceldas son las compatibles con un submodelo Periódico Clásico (Sec. 3.10) sobre la frontera Γ_μ (CBE), verificando así las restricciones dadas por las Ecs. (3.11) y (4.16). Estas restricciones cinemáticas se mantienen tanto la etapa estable como durante la etapa inestable del material (Fig. 8.1-c). A su vez, durante la etapa inestable ($t > t_N$), se incorporan condiciones borde sobre el dominio localizado Ω_μ^L (CBNE), compatibles con un submodelo de Taylor (el cual prescribe $d\tilde{u}_\mu = \mathbf{0} \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L$, ver Sec. 4.7), satisfaciendo así la restricción dada por la Ec. (4.17).

El material que constituye la matriz en la microescala está caracterizado por un modelo constitutivo fenomenológico de daño sólo tracción, con un módulo de elasticidad $E_\mu = 200000$ [MPa], un coeficiente de Poisson $\nu_\mu = 0,2$, una tensión última uniaxial $\sigma_{u\mu} = 2,4$ [MPa] y una energía de fractura $G_{F\mu} = 0,5$ [Nm/m²]. Por conveniencia en la determinación del dominio localizado y la imposición de las condiciones de borde no estándar sobre Ω_μ^L (Sec. 4.3), los poros se modelan como un material elástico con un módulo de elasticidad muy pequeño (2×10^{-6} [MPa]).

Cada punto \mathbf{x} de la macroescala está vinculado a una microcelda con las características explicadas previamente. En este ejemplo se resuelven dos problemas, ambos con la misma macroestructura pero utilizando microceldas con distribución de elipses diferentes: RVE₁ y RVE₂ (ver Fig. 8.1-b).

Para la resolución numérica en la macroescala se utilizan elementos finitos triangulares lineales del tipo E-FEM, discutidos en detalle en el Cap. 5. A nivel micro se considera un esquema de fisura difusa (SCA, Rots et al. (1985); Oliver et al. (1990)) y cuadrángulos bilineales estándares. En la Fig. 8.1-b se muestran las mallas de elementos finitos correspondientes a los RVE₁ y RVE₂, compuestas por 2142 y 2122 elementos, respectivamente.

Para la determinación del dominio localizado, Ω_μ^L , se sigue el criterio descrito en Sec. 4.8. En relación a la definición de las normales micro, \mathbf{n}_μ , y el espesor de la banda de falla micro, ℓ_μ (ambas magnitudes variables espacialmente), se determina una *curva* ficticia, \mathcal{S}_μ , centrada respecto a la *superficie* Ω_μ^L (ver Fig. 4.2). Se utiliza el sentido de la normal macro, \mathbf{n} , para una correcta definición del sentido de las normales micro (Fig. 8.1-c).

8.2.2. Resultados

En la Fig. 8.2 se muestran las curvas de respuestas homogeneizadas asociadas al RVE₁ y al RVE₂. En eje de abscisas se grafica el desplazamiento vertical Δ impuesto y en ordenadas la fuerza resultante vertical F del extremo superior de la barra (véase también Fig. 8.1-a).

Debido a que la macroescala es homogénea (cada punto $\mathbf{x} \in \Omega$ está vinculado a la misma microcelda con idéntica estructura) durante la etapa estable y, hasta la bifurcación, el material macro posee una distribución uniforme de esfuerzos (barra uniaxial sometida a tracción), todos los puntos materiales macroscópicos bifurcan simultáneamente. En la Fig. 8.2 se indica ese instante de bifurcación (Sec. 2.5) junto con el instante de nucleación de la fisura cohesiva macro (Sec. 2.3). Este último punto también corresponde al instante de activación (Sec. 2.6) del modelo cohesivo multiescala (MMCo, Cap. 4).

A nivel macroscópico se detecta inestabilidad material cuando el desplazamiento impuesto alcanza el valor $\Delta = 0,248 \times 10^{-4}$ [mm], en el problema correspondiente al RVE₁ y $\Delta = 0,254 \times 10^{-4}$ [mm], en el correspondiente al RVE₂. Para lograr que el dominio localizado se forme correctamente, se permite que transcurran algunos pocos pasos de tiempo entre la bifurcación y la activación de la fisura cohesiva. Para la macroestructura asociada al RVE₁ la fisura se activa cuando se alcanza el valor $\Delta = 0,288 \times 10^{-4}$ [mm] mientras que para la barra macro vinculada al RVE₂, la interfaz cohesiva se nuclea para $\Delta = 0,294 \times 10^{-4}$ [mm]. Como se aprecia (ver también la Fig. 8.2), este período es muy reducido y no tiene influencia alguna en la respuesta global.

A partir del análisis de bifurcación sobre el tensor constitutivo homogeneizado se determina el ángulo θ_n que define la normal \mathbf{n} a la fisura \mathcal{S} en la macroescala (Fig. 8.1-a). Para el RVE₁ resulta $\theta_n = 95,4^\circ$ mientras que para el RVE₂ $\theta_n = 89,55^\circ$.

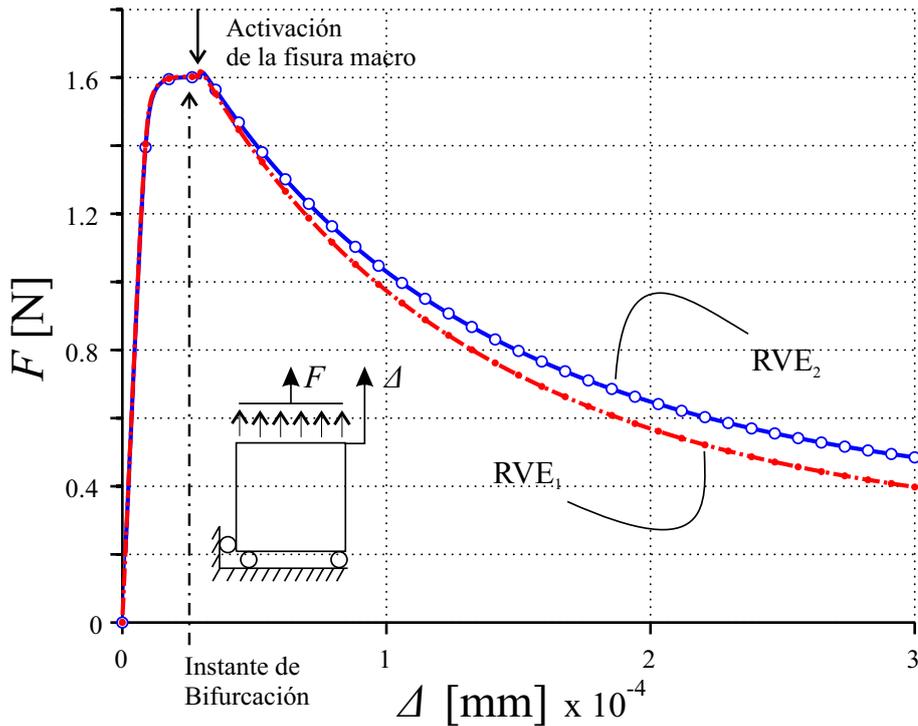


Figura 8.2: Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios. Gráfica de la fuerza vertical total F vs. el desplazamiento vertical Δ prescrito en el extremo superior de la barra, para los RVE₁ y RVE₂ y la formulación multiscala propuesta (FMOF).

En la Fig. 8.3 se muestra la distribución de la variable de daño para distintos instantes de análisis y para el RVE₁. En la Fig. 8.4 se indican distintas etapas de la evolución del criterio para la determinación del subdominio localizado Ω_μ^L , tanto para el RVE₁ como el RVE₂. En ambas figuras, se asocia el mapa de daño/subdominio localizado con puntos sobre la gráfica de respuesta homogeneizada F - Δ : \textcircled{A} ($\Delta = 0,1 \times 10^{-4}$ [mm]), \textcircled{B} ($\Delta = 0,196 \times 10^{-4}$ [mm]), \textcircled{C} ($\Delta = 0,288 \times 10^{-4}$ [mm], nucleación de la macro fisura) y \textcircled{D} ($\Delta = 2,936 \times 10^{-4}$ [mm]).

Un aspecto interesante, observado en las Figs. 8.3 y 8.4, es que durante la etapa estable del material, evolucionan diversas bandas de falla micro (zonas dispersas con degradación y crecimiento de daño) y que, eventualmente por efecto de la degradación y localización, coalescen en una única banda genérica con camino tortuoso. El instante de coalescencia micro en una única banda de falla está directamente asociado al instante de bifurcación macroscópica.

El subdominio localizado Ω_μ^L se determina al momento de activar la fisura cohesiva, manteniéndose invariable hasta finalizar el análisis. Por ello, las gráficas correspondientes a los puntos \textcircled{C} y \textcircled{D} en la Fig. 8.4 indican como son los subdominio Ω_μ^L resultantes, observándose que tienen una topología compleja.

En la Fig. 8.2 se advierte que los resultados obtenidos para ambas microceldas son similares, tanto en la curva de respuesta homogeneizada como en los tiempos de bifurcación e inclinación de la normal a la fisura (\mathbf{n}). En la etapa estable las respuestas se corresponden casi exactamente. En la etapa inestable se observa una pequeña diferencia, atribuible a aleatoriedad en la definición de las microceldas, de las mallas de elementos finitos y las disimilitudes en el dominio de falla resultante (Fig. 8.4). Se argumenta entonces que este resultado muestra consistencia y prueba la capacidad de modelado de la formulación propuesta. Considere que las pequeñas diferencias mencionadas atribuirse también la reconocida deficiencia inherente a los elementos cuadrangulares lineales estándares para capturar dominios arbitrarios de localización (Jirásek y Bauer, 2012), como se observa en la forma que adopta el subdominio localizado en la Fig. 8.4 (Punto \textcircled{C}), en especial cuando la banda de falla atraviesa elementos finitos mal direccionados respecto a ésta.

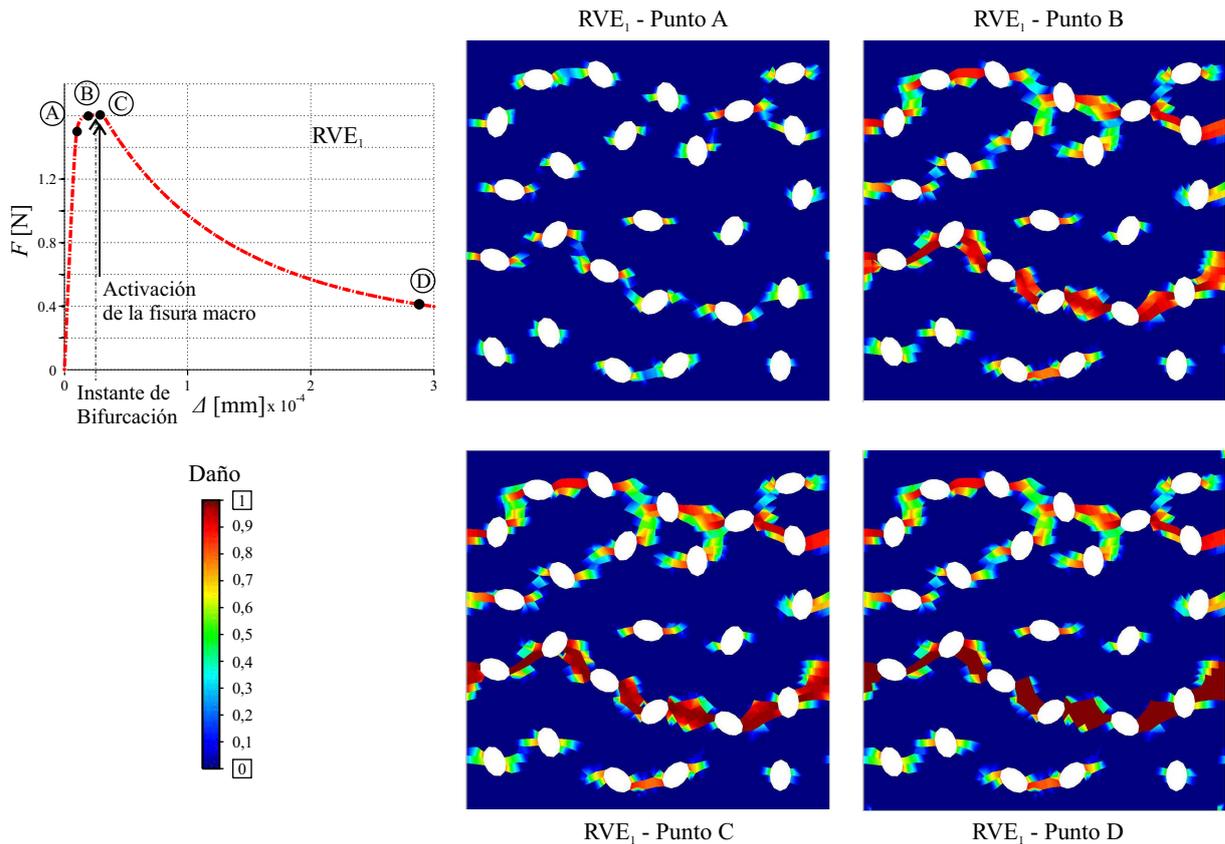


Figura 8.3: Estiramiento uniaxial de barra con microestructura de poros elípticos aleatorios. Evolución de la variable de daño en el RVE_1 , para distintos estados de análisis.

8.3. Viga entallada simplemente sustentada en modo flexión (SENB: Single-Edge Notched Bending test)

En este último ejemplo numérico se evalúa el desempeño de la formulación multiescala propuesta aplicada a un problema clásico en el ámbito de la mecánica de fractura fenomenológica, al cual aquí se adapta al contexto del modelado multiescala. En particular, se pretende cuantificar la energía de fractura puesta en juego a nivel macro inducida por el desarrollo de mecanismos de falla que toman lugar en la microestructura del material. Para lograr este objetivo, se ha seleccionado un ejemplo en el cual la energía de fractura puede estimarse a-priori, con suficiente aproximación. En la micro estructura el mecanismo de localización de deformaciones se pre-induce mediante la definición de propiedades materiales. Otra característica importante es que, en la macroescala, el camino de propagación de la fisura cohesiva también puede estimarse en forma precisa. Este último tópico evita la necesidad de algoritmos de trazado de discontinuidades en sólidos (ver Pie de Página 1 de Cap. 5, página 62), permitiendo focalizar el esfuerzo en cuestiones mecánicas más fundamentales de la formulación multiescala en sí misma.

El test consiste en una viga entallada simplemente apoyada sometida a flexión, debido a la aplicación de un desplazamiento descendente vertical prescrito en el punto central superior de la estructura. Para el análisis propuesto se consideran tres vigas con idéntica definición geométrica a nivel macro, ver Fig. 8.5-e, no obstante cada una de ellas posee una microestructura diferente (Toro et al., 2013c). Se considera además hipótesis de estado plano de deformaciones y un espesor $e = 1 [m]$, para todos los casos.

8.3.1. Descripción de la microestructura material

Se estudia tres tipos de micro estructuras periódicas con un arreglo regular de poros. En las Figs. 8.5-a, 8.5-b y 8.5-c puede observarse un detalle de las microestructuras heterogéneas consideradas. La porosidad (fracción de vacíos con respecto al volumen total, ver Sec. 8.2.1) en cada caso es: $f_v = 0,000$, $f_v = 0,037$

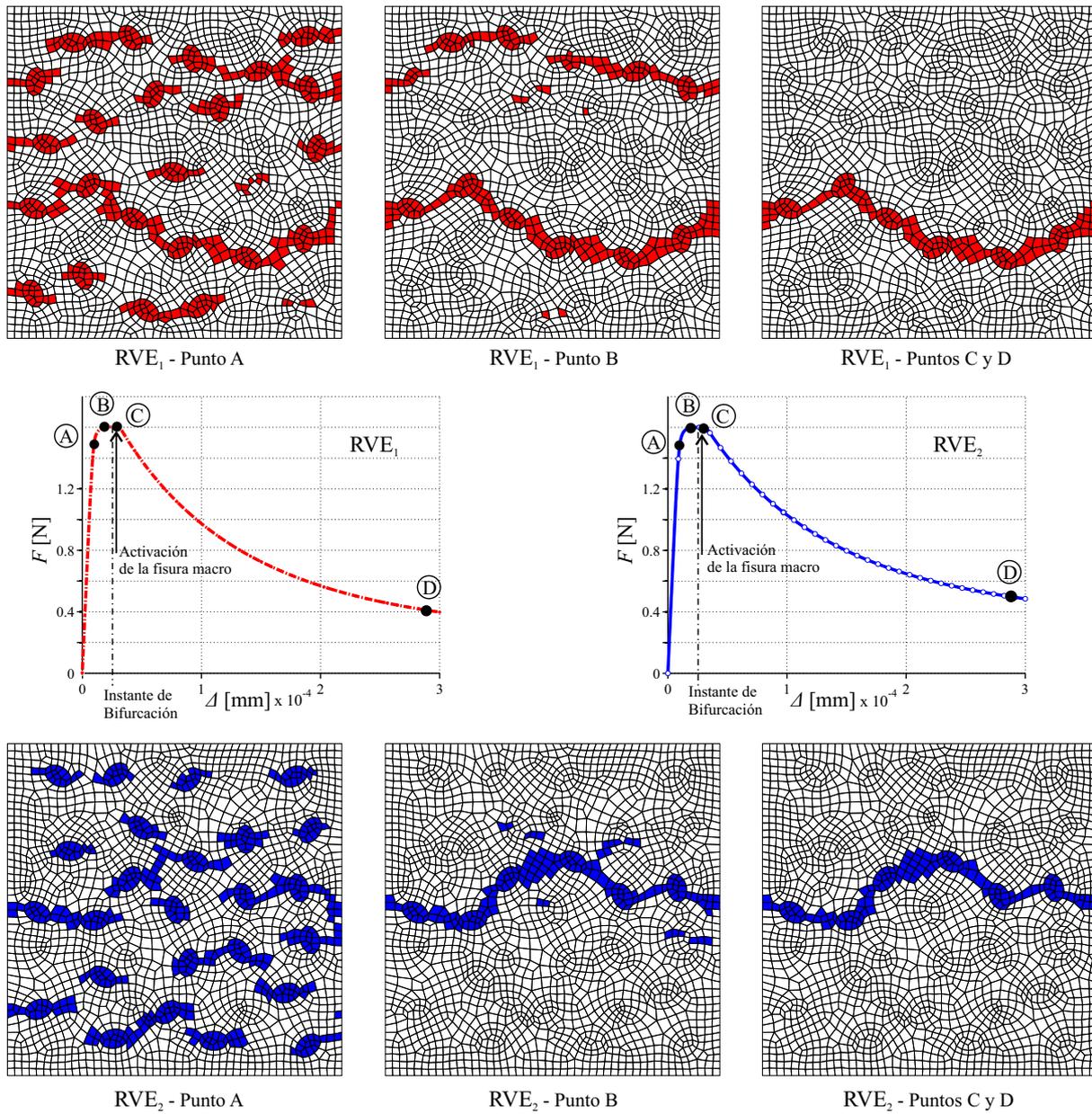


Figura 8.4: Estiramiento uniaxial de barra con micro-estructura de poros elípticos aleatorios. Evolución del criterio para la determinación del subdominio localizado Ω_{μ}^L , en los RVE₁ y RVE₂.

y $f_v = 0,111$, respectivamente. Otra característica importante que define la topología micro estructural adoptada es la presencia de una banda vertical central de espesor finito que atraviesa los poros, la cual viene caracterizada por un modelo de daño que degrada sólo bajo estados de tracción. Este material se denota como M1 en la Fig. 8.5. El material M1 está embebido dentro de una matriz elástica representada por M2, en la misma Figura. Los poros están modelados como un material elástico extremadamente débil: M3 ($E_{\mu M3} \approx 0$). El hecho de tratar los poros de esta forma simplifica el procedimiento algorítmico utilizado para detectar el dominio con localización de deformaciones Ω_{μ}^L , como también la frontera Γ_{μ}^L donde debe prescribirse la condición de borde no estándar (CBNE). A partir de esta definición material, el modo de falla micro propagará, indefectiblemente, a lo largo de la banda vertical central atravesando los poros.

El material M4, definido a nivel de la estructura macro, se comporta de acuerdo al modelo multiescala propuesto, es decir, el estado de tensión macro generalizado $\{\sigma, T\}$ depende de la historia de deformaciones macro generalizadas $\{\epsilon_R, \beta\}$ a través del procedimiento de homogeneización microestructural descrito por la aproximación FMOF. Por otro lado, el material denotado como M5 (a nivel macro) viene caracterizado por un comportamiento elástico definido por la siguiente ecuación:

$$d\sigma = C : d\epsilon \quad (8.1)$$

donde C representa el tensor constitutivo elástico homogeneizado de cada RVE, obtenido mediante la Ec. (3.35) del Cap. 3, en un proceso de carga elástico (sin degradación microestructural). Para cada microestructura, el tensor C se determina mediante un análisis multiescala previo. Es decir el material M5 responde según un modelo elástico fenomenológico derivado a partir de un análisis multiescala. Debe notarse que esta técnica permite modelar gran parte de la viga macro considerando la microestructura adoptada, pero sin necesidad de realizar un salto de escala, optimizando así recursos computacionales. Esta metodología puede aplicarse debido a que se conoce a-priori el camino de propagación de la fisura macro (propagación vertical a partir de la entalla). Luego se sabe de antemano que el resto de la estructura macro necesariamente se comporta en forma elástica.

Los parámetros que definen a los materiales M1, M2 y M3 están detallados en la Tabla 8.1 donde E_{μ} es el módulo de elasticidad, ν_{μ} es el coeficiente de Poisson, $G_{F\mu}$ es la energía de fractura y $\sigma_{u\mu}$ es tensión última uniaxial del material.

Material	Modelo Constitutivo	E_{μ} [GPa]	ν_{μ}	$G_{F\mu}$ [N/m]	$\sigma_{u\mu}$ [MPa]	Tipo de Elemento Finito
M1	Daño (microestructura)	20	0,20	100	2,4	Cuadrángulo bilineal
M2	Elasticidad (microestructura)	20	0,20	–	–	Cuadrángulo bilineal
M3	Elasticidad (microestructura) (Poro)	0	0	–	–	Cuadrángulo bilineal
M4	Multiescala (macroescala)	–	–	–	–	Triángulo Lineal con Discontinuidades Fuertes
M5	Elasticidad homogeneizada (macroescala)	–	–	–	–	Cuadrángulo bilineal

Tabla 8.1: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB). Propiedades de los material de acuerdo a la denominación dada en la Fig. 8.5 Descripción del tipo de elemento finito utilizado.

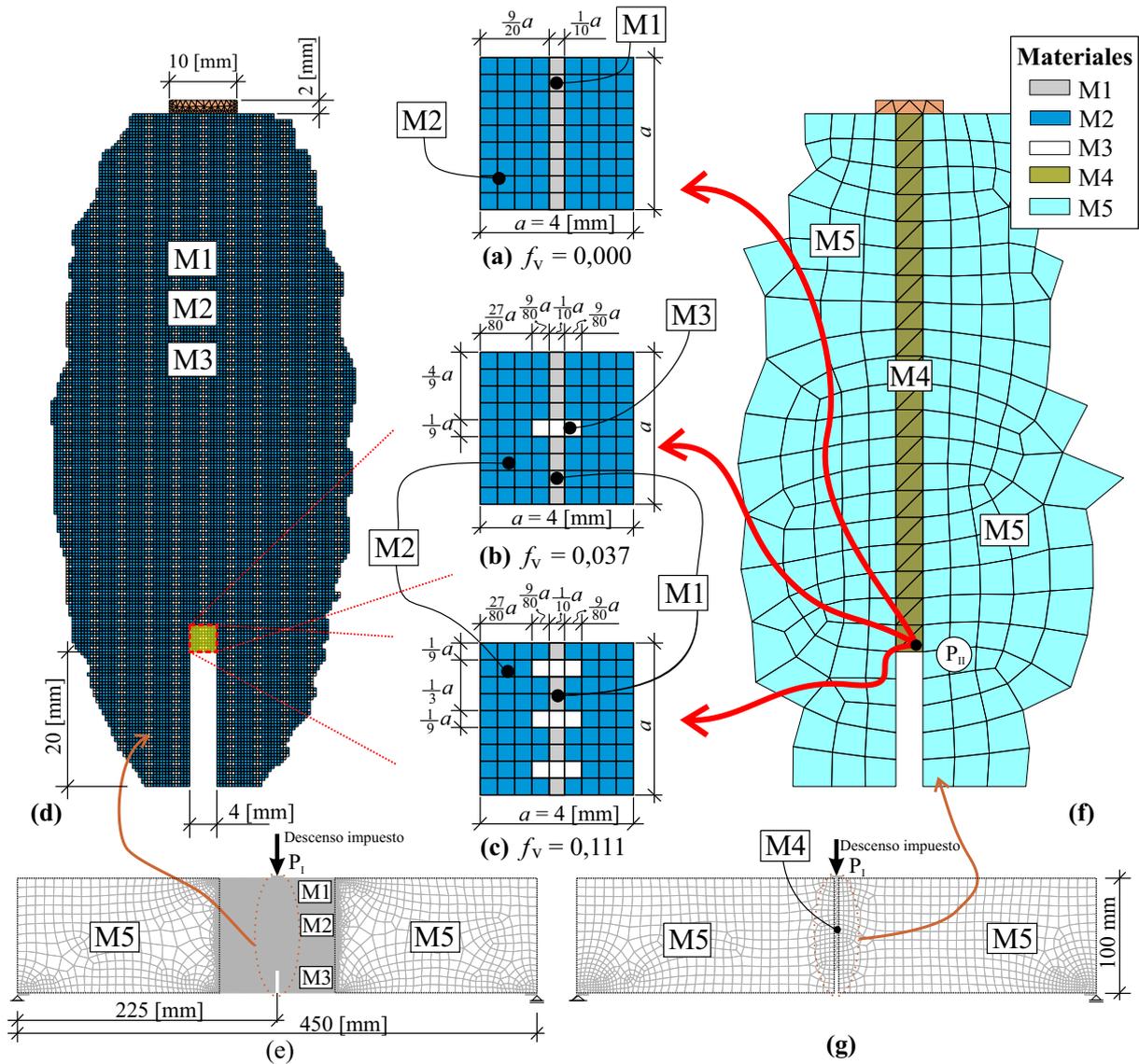


Figura 8.5: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): (a)-(c) Malla de elementos finitos para las microceldas consideradas con diferentes grados de porosidad; (d)-(e) Descripción geométrica y malla de elementos finitos para el modelo DNS; (f)-(g) Descripción geométrica y malla de elementos finitos macro para el modelo multiscala.

8.3.2. Modelos numéricos

Con el fin de comparar en forma rigurosa la performance numérica de la formulación multiescala propuesta en esta tesis, se han utilizado dos tipos de metodologías diferentes para resolver los ejemplos de esta Subsección, a saber:

(i) Aproximación Multiescala “MS” (Multiscale) aplicando la FMOF:

En este modelo, la viga macro está compuesta por 40 elementos finitos triangulares con discontinuidades fuertes embebidas (E-FEM, Sec. 5) en la banda de localización, ver material M4 en las Figs. 8.5-f y 8.5-g, más 1136 elementos cuadriláteros clásicos representando el material M5. Las microceldas se modelan vía una técnica de fisura difusa (SCA) utilizando cuadrángulos convencionales (ver las mallas de elementos finitos que se muestran en las Figs. 8.5-a, 8.5-b y 8.5-c).

(ii) Aproximación por Simulación Numérica Directa (*Direct Numerical Simulation*, DNS):

La malla de elementos finitos se indica en las Figs. 8.5-d y 8.5-e. En este modelo se resuelve una única escala (la escala macro) con suficiente nivel de discretización para capturar todos los detalles y heterogeneidades propias de la micro estructura subyacente. El modelo DNS sólo representa la parte central de la viga (ver Figs. 8.5-d y 8.5-e). El resto de la macroestructura se considera mediante el material homogeneizado M5. El modelo así obtenido posee un total de 53703 elementos finitos cuadriláteros convencionales. Se utiliza una técnica de fisura difusa (SCA) para regularizar el comportamiento de ablandamiento material. El patrón microestructural, para definir la zona vertical donde se espera que ocurra la falla en el modelo DNS, se basa en una repetición periódica de microceldas, idénticas en tamaño y geometría a aquellas utilizadas para la definición de los RVEs en las simulaciones multiescala, observar la Fig. 8.5-d y las Figs. 8.5-a, 8.5-b y 8.5-c. Además la distribución de materiales también es idéntica a la utilizada en las simulaciones de tipo multiescala.

Los resultados obtenidos tras aplicar la aproximación DNS se toman como patrón de referencia a partir del cual se corrobora la coherencia física/mecánica del modelo propuesto en este trabajo. Advertir que, en casos complejos y generales, este tipo de comparaciones representa probablemente el único medio confiable y riguroso para validar formulaciones multiescala.

En las simulaciones basadas en el modelo multiescala (FMOF), y durante la respuesta estable macroscópica, se colocan condiciones de mínima restricción cinemática en las fronteras de los RVEs que representan la micro estructura heterogénea material, tal como se indica en la Fig. 8.6-a (ver Secs. 3.10 y 6.1.2). Una vez detectada la condición de bifurcación en un elemento finito macro (Sec. 5.4), al RVE asociado al punto de Gauss localizado PGL (ver Sec. 5.3) se le agregan las condiciones de borde no convencionales propuestas en este trabajo (CBNE). En particular, se adopta una condición de borde de tipo Lineal (Sec. 4.7) en incrementos de fluctuaciones de desplazamiento micro para las CBNE en Γ_{μ}^L , ver Fig. 8.6-b. Por otro lado, la microcelda relacionada con el punto de integración regular macro (PGR según la nomenclatura introducida en el Cap. 5) está sujeta a las mismas restricciones cinemáticas definidas para el régimen precrítico del material, como se observa en la Fig. 8.6-a. Recordar además que para aquellos elementos finitos que han activado una fisura cohesiva macro, se obliga un comportamiento de descarga elástica en todos los PGR, durante la etapa posbifurcación.

Una de las diferencias conceptuales más importantes que existe entre el modelo FMOF y el DNS radica en que el primero utiliza una técnica de discontinuidades fuertes embebidas para simular la falla a nivel macro, mientras que en el segundo el proceso de degradación y falla se modela utilizando una cinemática continua en el contexto de la aproximación por fisura difusa. No obstante ello, no debieran esperarse diferencias sustanciales en la respuesta macroscópica y la comparación sigue siendo perfectamente válida.

8.3.3. Energía de fractura homogeneizada obtenida utilizando el modelo FMOF

La Fig. 8.7 muestra la respuesta estructural para el problema en estudio, en términos de la carga total vs. el desplazamiento vertical del punto central superior de la viga (P_I). Como puede observarse,

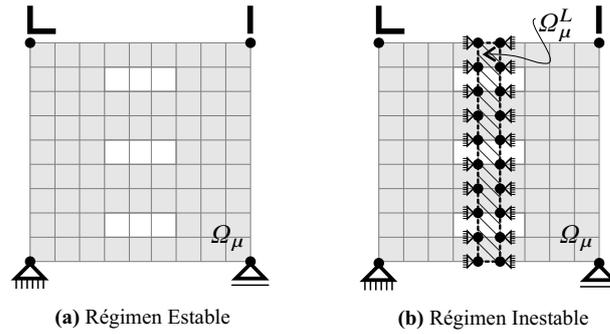


Figura 8.6: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Esquema de condiciones de borde aplicadas al RVE.

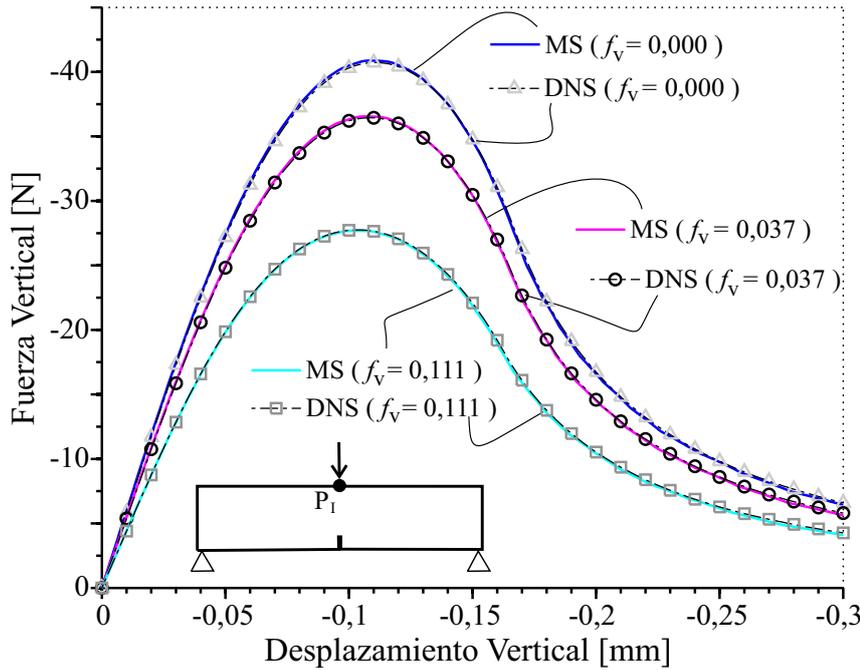


Figura 8.7: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Curvas carga vs. desplazamiento vertical referida al punto P_I , obtenidas utilizando el modelo FMOF y DNS, para los diferentes niveles de porosidad f_v .

el modelo FMOF y DNS brindan prácticamente la misma solución homogeneizada para las diferentes micro estructuras analizadas. Tal como era de esperarse, microceldas con mayor fracción volumétrica de poros (porosidad f_v), requieren menor energía para agotar completamente la estructura.

Además, en la Fig. 8.8-a se visualiza la respuesta cohesiva homogeneizada correspondiente al punto de cuadratura macro en donde se detecta por primera vez bifurcación material (punto de Gauss Localizado próximo al punto identificado como P_{II} en la Fig. 8.5-f). Las relaciones constitutivas de la Fig. 8.8-a representan las componentes normales de la tracción (T_n) y salto de desplazamiento (β_n). Notar que el vector de la apertura de fisura corresponde a un modo I puro.

Utilizando la lista de pares ordenados de la Fig. 8.8-a, es posible evaluar la densidad de energía homogeneizada (por unidad de superficie) disipada en el punto P_{II} , la cual se pone en juego para agotar completamente la fisura macro asociada a dicho punto. Así, la energía de fractura efectiva G_F (del modelo constitutivo cohesivo multiescala) se evalúa simplemente determinando el área bajo la curva T_n - β_n :

$$G_F = \int_{\beta(t_N)=0}^{\beta(\infty)} \mathbf{T} \cdot d\boldsymbol{\beta} \quad (8.2)$$

El resultado obtenido tras aplicar la ecuación previa se muestra en la Tabla 8.2, columna 2. Por otro lado, se puede estimar la energía disipada por cada RVE (G_F^{est}) computando las contribuciones de energía

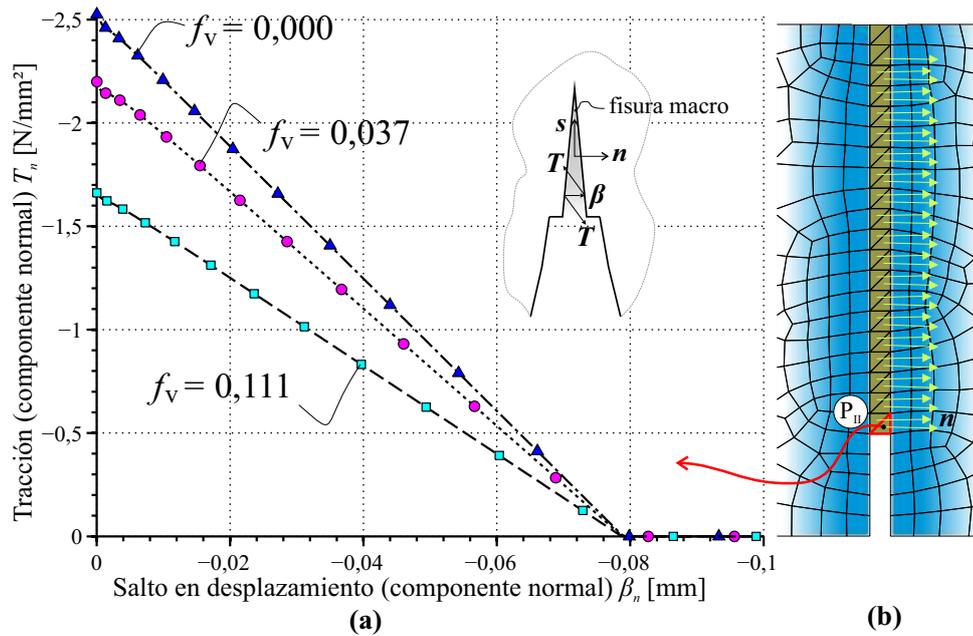


Figura 8.8: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Respuestas cohesivas homogeneizadas referidas al punto P_{II} , obtenidas utilizando el modelo FMOF para diferentes niveles de porosidad f_v (Componente normal de la tracción T vs. Componente normal del salto β).

de todos los elementos finitos que pertenecen a la banda de localización micro Ω_μ^L , incluyendo los poros:

$$G_F^{\text{est}} = \frac{1}{|\Omega_\mu^L|} \int_{\Omega_\mu^L} G_{F\mu} d\Omega \quad (8.3)$$

donde $G_{F\mu} = 100$ [N/m] para el material M1 y $G_{F\mu} = 0$ [N/m] para el material M3, como se muestra en la Tabla 8.1. Los valores estimados de las energías, G_F^{est} , se muestran en la Tabla 8.2, columna 4, para cada micro estructura. Advertir el efecto que tiene la fracción en volumen de poros sobre la magnitud de la energía de fractura calculada.

RVE	Energía de fractura efectiva vía FMOF G_F [N/m]	Porosidad f_v (asociada a Ω_μ^L)	Estimación de Energía de fractura G_F^{est} [N/m]
$f_v = 0,000$	99,90	0,000	100
$f_v = 0,037$	88,42	0,111	88,89
$f_v = 0,111$	66,16	0,333	66,67

Tabla 8.2: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Energía de fractura efectiva evaluada para diferentes porosidades (f_v) en Ω_μ^L .

Comparando los valores de G_F y G_F^{est} se observa que, para el RVE sin poros, existe una coincidencia prácticamente exacta entre ambas magnitudes. Una leve diferencia puede apreciarse para los casos de microestructuras con uno y tres poros. Este resultado se debe a que G_F^{est} se determina asumiendo que, durante el régimen estable (es decir previo a la detección de bifurcación macro), no existe disipación de energía. En el caso del RVE sin poros, el problema micro es homogéneo antes de la bifurcación dado que los materiales M1 y M2 tienen las mismas constantes elásticas. Además, la condición de bifurcación macroscópica ocurre al mismo tiempo que el material M1 (caracterizado por un modelo de daño) alcanza su resistencia límite. Luego, la hipótesis de que no existe disipación previa a la bifurcación es correcta. Sin embargo, en los casos de RVEs con poros, el daño microestructural comienza incluso durante la etapa estable. Bajo estas circunstancias, el cálculo de G_F^{est} utilizando la Ec. (8.3) no resulta del todo correcto

ya sobreestima la energía de fractura homogeneizada para el material M4. Aún así, sirve para mostrar la consistencia energética y la adecuada determinación del valor de G_F que se obtiene mediante la técnica FMOF propuesta.

En la Fig. 8.8-b se observan los vectores normales (\mathbf{n}) a la superficie de discontinuidad macroscópica, evaluados mediante el criterio discutido en la Sec. 5.4

Por último, en la Fig. 8.9 se demuestra consistencia de la respuesta homogeneizada multiescala en términos del tamaño de elemento finito macro (problema con porosidad $f_v = 0,111$). Observe que la malla del Caso 2 (Malla 2) posee tamaños de elementos menores respecto al Caso 1 (Malla 1), precisamente en la zona de definición del material M4, el cual es constitutivamente simulado por el modelo multiescala propuesto.

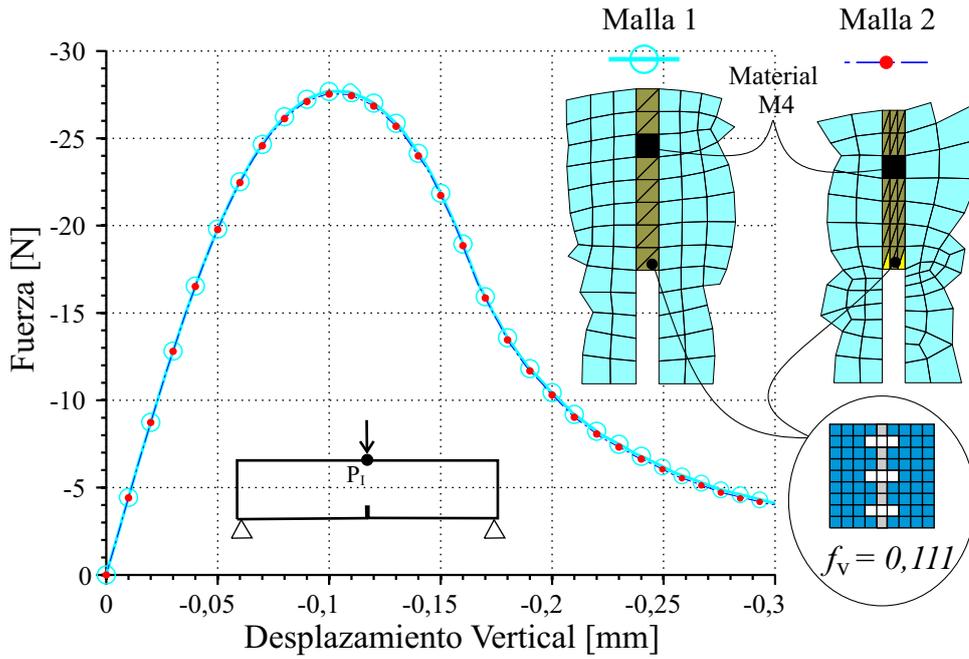


Figura 8.9: Viga entallada simplemente apoyada en modo flexión (SENB): Curva Carga vs. Desplazamiento vertical referida al punto P_1 obtenida utilizando el modelo FMOF, para dos discretizaciones diferentes a nivel macro.

Parte V

Conclusiones

Capítulo 9

Conclusiones

A lo largo del presente trabajo de investigación se han logrado contribuciones tanto en lo que respecta a la formulación teórica de estrategias multiescala para el modelado de falla material, como también en el desarrollo e implementación eficiente de algoritmos adaptados al cálculo en múltiples escalas de análisis. Si bien ambos aspectos son de crucial importancia para simular problemas reales, reconocemos que los aportes más significativos de esta tesis se han dado a nivel de la formulación mecánica básica. A continuación elaboramos una breve discusión sobre estos tópicos.

9.1. Discusión y aportes a nivel de la Formulación Mecánica Multiescala

Las leyes constitutivas fenomenológicas convencionales poseen restricciones importantes para modelar en forma realista materiales con microestructura heterogénea. Esta deficiencia obedece a diferentes cuestiones, como por ejemplo: (i) limitaciones para considerar caminos arbitrarios de cargas, (ii) dificultad en su formulación matemática/termodinámica, (iii) complejidad en la implementación numérica, (iv) gran cantidad de parámetros que deben caracterizarse mediante ensayos de laboratorio, muchas veces costosos y/o difíciles de implementar entre otras. Por ello, en los últimos tiempos se han buscado alternativas. Una opción natural es introducir explícitamente las heterogeneidades microestructurales en la escala de análisis, como se hace, por ejemplo, en la técnica denominada Simulación Numérica Directa (DNS). Otra elección posible, que ha tomado gran impulso en la actualidad, son las Formulaciones Multiescalas.

Las Formulaciones Multiescalas dividen el problema mecánico en diversas escalas de análisis, con longitudes características diferentes. El nivel de acoplamiento entre éstas es menor si se compara frente a un esquema DNS. Resignar acoplamiento mecánico entre las escalas involucradas se traduce en forma directa en menor esfuerzo de cálculo numérico. El resultado derivado de un modelo multiescala debe entenderse como una respuesta media o característica para un tipo particular de microestructura. Una característica importante de estas técnicas es que las relaciones constitutivas se formulan a nivel de cada componente microestructural, utilizando para ello modelos simples, fáciles de formular y caracterizar. No obstante la respuesta media homogeneizada puede resultar altamente compleja debido a los fenómenos de interacción mecánica entre las fases. En este trabajo se han estudiado y desarrollado formulaciones que consideran sólo dos escalas (macro-micro), basadas en el concepto de RVE, con el fin de obtener respuestas constitutivas que caractericen el comportamiento homogeneizado del material, incluyendo el modelado de falla (Cap. 1).

Es propicio mencionar aquí que, aún para la potencia de cálculo disponible en los ordenadores actuales, la resolución numérica de un problema multiescala macro-micro acoplado, basado en el concepto de RVE, es muy demandante computacionalmente.

Los Modelos Multiescala Clásicos (denotados en esta tesis con la sigla MMCl, ver Cap. 3) han sido ampliamente difundidos y utilizados en el modelado de materiales con comportamiento constitutivo estable. La extensión directa de este tipo de modelo a materiales que experimentan ablandamiento y falla da origen a formulaciones mecánicas que pierden consistencia física, dado que la noción de RVE pierde sentido (Cap. 7). La respuesta homogeneizada resulta dependiente del tamaño microestructural,

fenómeno que hemos denominado *pérdida de objetividad*. La motivación principal del presente trabajo ha sido entonces proponer una nueva metodología multiescala que permita: (i) modelar falla material utilizando el concepto de RVE, (ii) que la misma pueda formularse a partir de una axiomatización clara de hipótesis y (iii) rigurosamente fundamentada desde un punto de vista mecánico. Cabe remarcar aquí, que este objetivo no ha sido alcanzado aún en la comunidad científica y, por ende, los desarrollos de esta tesis representan un aporte original en la temática.

Se entiende como modelado de falla a la capacidad de predecir el comportamiento constitutivo de un material durante toda la historia de carga, hasta alcanzar su total agotamiento. Una técnica de uso corriente para simular falla material, a nivel macro, es la incorporación de fisuras cohesivas en un medio continuo, cuya resistencia se degrada conforme evoluciona su apertura. En este documento se ha desarrollado una nueva formulación multiescala para este tipo específico de problemas, la cual abarca todo el proceso de deterioro material (Sec. 2.6). La misma considera: (i) modelado de la etapa estable, caracterizada por una respuesta constitutiva homogeneizada de tipo tensión-deformación, (ii) detección de inestabilidad material (bifurcación) y (iii) posterior tratamiento regularizado de la etapa inestable, regulada por una ley cohesiva homogeneizada de tipo tracción-salto. En la formulación propuesta “sí” es posible encontrar un tamaño de microcelda físicamente consistente, que satisface la definición de RVE. Precisamente, uno de los aportes principales del trabajo ha sido la formulación de una técnica multiescala que brinda una respuesta homogeneizada objetiva durante toda la historia de carga (Cap. 7).

9.1.1. Características esenciales de la metodología propuesta

La metodología multiescala propuesta es denominada Formulación Multiescala Orientada a Falla (FMOF). Un atributo importante es que la misma se desarrolla a partir de axiomas racionalmente justificados desde un punto de vista mecánico y variacional. Para tal fin, se introduce un *conjunto bien definido de hipótesis*, a saber:

- (i) Definición de la cinemática micro en términos de un *Operador de Inserción* aplicado a la cinemática macro, especialmente adaptado al problema de falla material.
- (ii) Introducción del concepto de *Admisibilidad Cinemática* macro-micro (Homogeneización de deformaciones).
- (iii) Incorporación del concepto de *Admisibilidad Energética* macro-micro (Principio variacional de Hill-Mandel).

A partir de este marco teórico, *es posible deducir consistentemente*:

- (i) El tipo de problema variacional a resolver en la microescala.
- (ii) El procedimiento para homogeneizar tensiones.
- (iii) La técnica para homogeneizar tracciones cohesivas.

La metodología considera la utilización de dos esquemas de homogeneización diferentes: un Modelo Multiescala Clásico (MMCl, Cap. 3) secuencialmente acoplado con un modelo Multiescala Cohesivo (MMCo, Cap. 4); este último representa la contribución original de la tesis.

El instante de tiempo específico en el cual se procede a realizar el cambio en el paradigma de homogeneización (es decir la transición del modelo MMCl hacia el modelo MMCo), se denomina tiempo de nucleación, t_N , precisamente porque es el instante de activación de la fisura cohesiva a nivel macro (Cap. 2).

La determinación de t_N se basa en realizar un análisis de bifurcación sobre el tensor de localización (Sec. 2.5), obtenido en función del tensor constitutivo homogeneizado (Sec. 3.11). Este criterio brinda como información adicional el vector normal a la fisura macro. El instante t_N divide la respuesta homogeneizada en dos regímenes: estable ($t < t_N$) e inestable ($t > t_N$). La detección precisa de t_N

es de fundamental importancia para lograr una transición continua entre los diferentes esquemas de homogeneización.

Durante la etapa estable, la respuesta constitutiva se obtiene a partir del Modelo Multiescala Clásico (Cap. 3), el cual brinda la tensión homogeneizada en función de la historia de deformación macro aplicada a la microescala (Ec. (2.16)). Esta metodología es bien conocida, aceptada y ampliamente utilizada, razón por la cual no hace falta plantear aquí ningún cambio en la misma. Se desarrolla como una forma de presentar el procedimiento general propuesto en este trabajo.

Una vez detectada la bifurcación material, al tiempo t_N , la respuesta constitutiva durante la etapa inestable viene regulada por el Modelo Multiescala Cohesivo (Cap. 4), el cual provee la tracción cohesiva homogeneizada en términos de la historia de apertura de fisura (Ec. (2.17)). Una de las características distintivas del modelo propuesto es que la fórmula para homogeneizar tracciones aplica sólo a una región específica del RVE, aquella donde el campo de deformaciones micro localiza. De esta forma se obtiene un procedimiento novedoso, no estándar, de promediado. Desde una visión más física del problema, podría interpretarse que la región microestructural representativa del comportamiento cohesivo macro deja de ser el RVE original y pasa a ser sólo la zona de falla micro. Además, esta importante cualidad del modelo no es un postulado de partida. Por el contrario es una consecuencia de las hipótesis cinemáticas (definición del operador de inserción) y del principio de admisibilidad energética (Principio de Hill-Mandel). Se observa así el formalismo cinemático/variacional adoptado como también las derivaciones del modelo, vía argumentos de dualidad.

El subdominio con localización de deformaciones micro (Ω_μ^L) debe identificarse claramente por dos motivos esenciales: (i) como se comentó antes, la homogeneización de tracciones cohesivas sólo se realiza en dicho subdominio y (ii) según el postulado de admisibilidad cinemática, es necesario incorporar nuevas restricciones cinemáticas (condiciones de borde no estándar) en la frontera del subdominio localizado. Este último punto (ii) representa un atributo distintivo de la metodología propuesta y se diferencia radicalmente de todos los modelos disponibles en la literatura. La imposición de estas nuevas condiciones de borde adicionales garantiza la objetividad de la respuesta cohesiva, respecto al tamaño del RVE, ante caminos arbitrarios de deformaciones macro aplicadas a la microestructura.

Siguiendo con nuestra filosofía axiomática de modelado, el método propuesto para la detección del subdominio localizado se basa exclusivamente en un criterio cinemático (Sec. 4.8). De esta forma es posible detectar subdominios generales que incluyen no sólo el material micro que degrada por ablandamiento sino también, dependiendo del contexto, defectos e inclusiones como poros, fibras de materiales elásticos débiles, etc.

9.2. Discusión y aportes a nivel de la Implementación Numérica

La discusión aquí se divide atendiendo a los desarrollos llevados a cabo para cada una de las aproximaciones numéricas en las escalas macro y micro, como también para la interface algorítmica propuesta y que posibilita la interacción entre ambas en forma consistente.

9.2.1. Escala micro

En toda formulación multiescala, basada en el concepto de RVE, el tratamiento de las restricciones cinemáticas a nivel de la microescala requiere especial atención. Modificando consistentemente estas restricciones pueden obtenerse diferentes categorías de submodelos, más rígidos o más flexibles. En general, este es un aspecto que diferencia la implementación de un modelo multiescala respecto a una aproximación numérica convencional por elementos finitos.

Este tópico adquiere aún mayor relevancia cuando se pretende modelar falla material. La razón es simple, modelos muy restringidos cinemáticamente pueden inhibir, o incluso coartar totalmente, los mecanismos de falla que la física del problema demanda. Por ello, se torna imprescindible en este contexto contar con suficiente flexibilidad en relación al gerenciamiento de condiciones de borde.

Como queda en evidencia a partir de la lectura del trabajo presente, la técnica multiescala propuesta (FMOF) introduce una nueva restricción cinemática adicional, no estándar (aquí denominada CBNE, Sec. 4.3), aplicada al incremento de fluctuaciones de desplazamientos y en un subdominio específico de la microcelda. Esta nueva condición se impone durante el análisis, específicamente cuando la respuesta homogeneizada se torna inestable desde el punto de vista constitutivo (tiempo de nucleación t_N). Para el tratamiento numérico de estas restricciones no convencionales, como también para las condiciones de borde clásicas del problema multiescala (CBE), se ha implementado un esquema muy general y flexible, basado en la técnica de condensación interna de grados de libertad (ver Cap. 6). Esta metodología permite codificar en un mismo formato algorítmico un gran número de restricciones cinemáticas. También posibilita modificar a voluntad las condiciones de borde para generar diferentes submodelos multiescalas, o bien combinaciones de submodelos, incluso esta manipulación puede realizarse durante la resolución del problema mecánico. Este ítem representa uno de los principales aportes numéricos de la tesis.

9.2.2. Escala macro

En relación al modelo numérico macro, ha sido necesario implementar una tipología específica de elemento finito para modelar nucleación y propagación de fisuras cohesivas (Cap. 5). Esta técnica incorpora un campo cinemático adicional (el vector de apertura de fisura o salto de desplazamiento) como variable independiente respecto al campo de desplazamiento estándar (continuo). Para tal propósito se ha adoptado la tecnología denominada E-FEM. La respuesta homogeneizada, tracción vs. salto, para la fisura embebida en dicho elemento se deriva a partir del modelo multiescala cohesivo propuesto en esta tesis (MMCo).

Podemos argumentar que el aporte concreto del trabajo a este nivel de análisis (escala macro), se ha dado en cuanto a la eficiencia computacional del código desarrollado, aspecto que comentamos a continuación.

Al definir el problema macroscópico es posible incorporar la noción de “SET” de elementos finitos. Cada SET posee, básicamente, dos atributos esenciales: la tipología del elemento utilizada (triangulares, cuadrangulares, con discontinuidades embebidas, etc.) y el tipo de comportamiento constitutivo. Existen dos tipos de comportamientos constitutivos: (i) tipo fenomenológico y (ii) tipo multiescala. Esto quiere decir que, en la macroestructura, pueden coexistir subdominios (conjunto de elementos finitos o SET) que requieren ser resueltos de manera diferenciada, ya sea mediante un procedimiento convencional fenomenológico haciendo uso de algoritmos clásicos de return-mapping o bien realizando el correspondiente salto de escala y posterior procedimiento de homogeneización.

Sobre el SET de elementos finitos de tipo multiescala es posible distribuir el cálculo en diversos procesadores, ya que la respuesta constitutiva de cada elemento del SET resulta: (i) costosa computacionalmente y (ii) desacoplada del resto. Así, cada proceso de cálculo resuelve, por sí mismo, un problema de elementos finitos; aquél definido a nivel de cada RVE. En realidad como el particionamiento de cálculo se realiza a nivel de los elementos, cada procesador requiere resolver tantos problemas micro (no lineales) de elementos finitos como puntos de integración posea el elemento finito macro, y esta tarea repetirla por cada iteración no lineal del esquema de equilibrio macro y por cada paso de carga.

Muy recientemente, y por ende fuera del informe presente, se han realizado pruebas de escalabilidad del modelo numérico propuesto, en un ordenador de memoria compartida que posee 288 núcleos (arquitectura de computo disponible instalaciones de la UPC). Los resultados obtenidos fueron muy alentadores, logrando niveles de eficiencia por arriba del 80 %, para problemas suficientemente demandantes. En realidad, este tipo de resultado es esperable ya que naturalmente el modelado multiescala, tal como fue concebido en esta tesis, es un problema altamente escalable, no obstante prueba que la implementación numérica desarrollada funciona adecuadamente.

9.2.3. Interfaz macro-micro

Desde una visión global, el paradigma numérico desarrollado considera el acoplamiento de dos esquemas de elementos finitos, uno para cada escala de análisis (estrategia denominada FE²). El punto

de conexión entre ambos se da a nivel de los puntos de integración del modelo macro. Para lograr este acoplamiento en forma eficiente, fue necesario diseñar una codificación basada en estructuras de datos relativamente complejas, que encapsulan gran cantidad de información microestructural, a nivel los puntos de Gauss macroscópicos. La transferencia de información entre ambos esquemas numéricos (macro-micro) es un punto clave de la implementación.

La comunicación o interacción numérica entre las escalas (interfaz computacional) requiere adicionalmente el desarrollo de algoritmos específicos de la formulación propuesta, entre los más importantes se mencionan:

- Procedimiento para evaluación del tensor tangente homogeneizado, tensor de localización y análisis de bifurcación.
- Procedimiento para homogeneización de campos.
- Procedimiento para la detección del subdominio con localización de deformaciones a nivel micro.
- Procedimiento para modificar restricciones cinemáticas durante el análisis.

Se ha hecho uso extensivo del concepto de encapsulamiento y abstracción de funciones. Esta técnica permite reutilizar prácticamente la totalidad del código desarrollado, independientemente de la escala de análisis. De esta forma, aspectos comunes a ambas aproximaciones numéricas (macro-micro) se comparten en su totalidad, como por ejemplo: librerías de elementos finitos, librerías de modelos constitutivos, esquemas de integración, rutinas de ensamble de matrices y vectores elementales, entre muchos otros procedimientos.

9.2.4. Resumen

En conclusión el código computacional desarrollado durante la tesis de doctorado atiende diversas cuestiones fundamentales e indispensables para realizar análisis de tipo multiescala, las cuales por practicidad repetimos y resumimos a continuación:

- (i) Flexibilidad en la imposición de restricciones cinemáticas a nivel del RVE.
- (ii) Acoplamiento entre modelo macro y micro siguiendo el paradigma FE².
- (iii) Diversidad de modelos constitutivos, en este aspecto diferenciamos modelos fenomenológicos convencionales y modelos constitutivos que encapsulan el proceso de salto de escala y homogeneización.
- (iv) Diversidad de tipologías de elementos finitos, incluyendo la posibilidad de combinar elementos convencionales con elementos con discontinuidades embebidas.
- (v) Desarrollo de una estructura de datos flexible y apropiada que soporta cálculo distribuido.
- (vi) Reutilización integral de funciones y rutinas comunes a ambas escalas de análisis (macro-micro).
- (vii) Desarrollo de un número importante de algoritmos que hacen viable la comunicación consistente entre las escalas involucradas (interfaz macro-micro).
- (viii) Si bien no se ha explotado en esta tesis, el código multiescala se ha diseñado sin restricciones en cuanto al número de escalas puestas en juego. Según esto, la extensión para realizar un cálculo con más de dos escalas es directa. No obstante, este tipo de simulaciones resultan, hoy por hoy, prohibitivas por el esfuerzo de cálculo demandante.

9.3. Discusión y aportes a nivel de Resultados Numéricos

En los Caps. 7 y 8 se han propuesto una serie de simulaciones numéricas direccionadas a evaluar críticamente el desempeño de la formulación multiescala planteada.

En primera instancia (Cap. 7), se analizaron problemas definidos exclusivamente a nivel micromecánico. El estudio incluye el modelado de diferentes tipologías microestructurales sometidas, cada una de ellas, a historias de deformaciones arbitrarias. Los resultados numéricos muestran que, utilizando la metodología multiescala propuesta, la respuesta constitutiva homogeneizada es objetiva respecto al tamaño del RVE. Remarcamos nuevamente que esta es una propiedad fundamental *exigible* a todo procedimiento de homogeneización.

En el mismo Cap. 7 se ha presentado un estudio para evaluar la influencia que tienen las condiciones de borde en la detección del modo de falla micro, analizando la respuesta homogeneizada hasta alcanzar el instante de nucleación t_N (bifurcación). En este caso, la tipología microestructural adoptada está constituida por una matriz material con una distribución periódica de poros circulares. La matriz material puede degradar su resistencia y rigidez según un modelo de daño isótropo. Este estudio muestra que los submodelos multiescalas de Mínima Restricción y Lineal convergen hacia la solución Periódica (considerada como exacta), tanto en la carga límite detectada como en el mecanismo de falla obtenido, en cada caso. La terminología convergencia debe entenderse aquí como la tendencia hacia un valor de referencia (solución periódica) en términos del tamaño microestructural analizado.

Por otro lado, en el Cap. 8 se han presentado dos ejemplos numéricos que hacen uso integral de la formulación multiescala propuesta (FMOF), ya que se considera la solución de problemas macro-micro totalmente acoplados. El primer ejemplo consiste en el estiramiento uniaxial de una barra cuya microestructura posee poros elípticos. Se han considerado dos RVEs diferentes, cada uno de ellos definido a partir de dos distribuciones aleatorias de poros elípticos, tanto en su ubicación como en su orientación. Para que la comparativa tenga sentido, ambas microceldas preservan la fracción volumétrica de vacíos (porosidad). Las respuestas homogeneizadas obtenidas muestran coherencia física/mecánica, para los dos RVEs considerados.

En el segundo ensayo numérico se modela una viga simplemente apoyada sometida a flexión. La microestructura de la viga posee bandas verticales susceptibles de presentar localización de deformaciones y diferentes niveles de porosidad. El aspecto clave a enfatizar en este ejemplo es el estudio comparativo efectuado entre la formulación multiescala propuesta en este trabajo y una aproximación de tipo DNS. Los resultados obtenidos muestran una coherencia más que aceptable entre ambas técnicas de modelado, para todos los niveles de porosidad considerados. Cabe mencionar que este tipo de comparativa representa la metodología más rigurosa para evaluar la calidad de una solución multiescala.

Por todo lo expuesto, nuestra conclusión final es que la formulación propuesta en esta tesis representa una técnica racionalmente formulada y numéricamente viable para el modelado multiescala de falla material basado en la noción de RVE.

9.4. Trabajos científicos derivados

La lista de referencias que se enumera a continuación puede considerarse como representativa de los estudios y desarrollos abordados durante la tesis de doctorado:

- *Failure-Oriented Multi-Scale Variational Formulation for Softening Materials*, P.J. Sánchez, P.J. Blanco, A.E. Huespe y R.A. Feijóo, Reporte Interno LNCC 2011 (Sánchez et al., 2011b).
- *Failure-Oriented Multi-scale Variational Formulation: Micro-structures with nucleation and evolution of softening bands*, P.J. Sánchez, P.J. Blanco, A.E. Huespe y R.A. Feijóo, CMAME 2013, (Sánchez et al., 2013).
- *A two-scale failure model for heterogeneous materials: numerical implementation based on the Finite Element Method*, S. Toro, P.J. Sánchez, A.E. Huespe, S.M. Guisti, P.J. Blanco y R.A. Feijóo, IJNME 2013 (Toro et al., 2013c).

- *Formulación multi-escala para materiales cuasi-frágiles heterogéneos considerando generación y propagación de fisuras en la celda unitaria. Fundamentos cinemáticos-variacionales*, S. Toro, P.J. Sánchez, A.E. Huespe, S.M. Guisti, P.J. Blanco, y R.A. Feijóo, MECOM 2010 ([Toro et al., 2010b](#)).
- *Variational multi-scale formulation for modelling material failure in heterogeneous solids*, P.J. Sánchez, S. Toro, A.E. Huespe, S.M. Guisti y R.A. Feijóo, CFRAC 2011 ([Sánchez et al., 2011a](#)).
- *Una nueva formulación multi-escala variacionalmente consistente para materiales sujetos a falla y fractura*, S. Toro, P.J. Sánchez, P.J. Blanco, R.A. Feijóo, S.M. Guisti y A.E. Huespe, ENIEF 2011 ([Toro et al., 2011](#)).
- *A variational multiscale model for fracture*, P.J. Sánchez, S. Toro, P.J. Blanco, A.E. Huespe y R.A. Feijóo, ECCOMAS 2012 ([Sánchez et al., 2012](#)).
- *Formulación Multi-Escala para modelar falla material: Comparativa frente a DNS*, S. Toro, P.J. Sánchez, A.E. Huespe, P.J. Blanco, S.M. Guisti y R.A. Feijóo, MECOM 2012 ([Toro et al., 2012a](#)).
- *Two-scale model for failure analysis of heterogeneous materials: numerical validation*, S. Toro, P.J. Sánchez, P.J. Blanco, A.E. Huespe y R.A. Feijóo, CFRAC 2013 ([Toro et al., 2013a](#)).
- *Modelo Multiescala para falla material: Aplicaciones a microestructuras con distribución aleatoria de heterogeneidades y malla de elementos finitos generales*, S. Toro, P.J. Sánchez, A.E. Huespe, P.J. Blanco, S.M. Guisti y R.A. Feijóo, ENIEF 2013 ([Toro et al., 2013b](#)).
- *A novel variational multi-scale formulation for softening materials* S. Toro, P.J. Sánchez, P.J. Blanco, R.A. Feijóo, S.M. Guisti y A.E. Huespe, II Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales ([Toro et al., 2010a](#)).
- *Modelado de Falla material mediante Formulacion Multi-escala*, S. Toro, P.J. Sánchez, A.E. Huespe, P.J. Blanco, S.M. Guisti y R.A. Feijóo, III Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales ([Toro et al., 2012b](#)).

Así mismo, las referencias listadas a continuación representan aportes preliminares, los cuales poseen una relación tangencial respecto al tema específico de la tesis:

- *Mesoscopic model to simulate the mechanical behavior of reinforced concrete members affected by corrosion*, P.J. Sánchez, A.E. Huespe, J. Oliver y S. Toro, IJSS 2010, ([Sánchez et al., 2010](#))¹
- *Numerical Modelling of the Load Carrying Capacity Degradation in Concrete Beams due to Reinforcement Corrosion*, WCCM-ECCOMAS 2008 ([Sánchez et al., 2008b](#)).
- *Análisis Numérico de un Problema de Deterioro Estructural causado por la Corrosión en las Armaduras del Hormigón Armado*, JAIE 2008 ([Toro et al., 2008](#)).
- *Mesoscopic Numerical Model to Simulate Degradation and Ultimate Load Carrying Capacity in Reinforced Concrete Structures Affected by Corrosion*, P.J. Sánchez, A. Huespe, X. Oliver y S. Toro, ENIEF 2008 ([Sánchez et al., 2008a](#)).
- *Desarrollo de un modelo constitutivo de daño-plástico para la simulación numérica de falla frágil-dúctil en el hormigón*, S. Toro, A. Huespe, J. Oliver, P. Sánchez y G. Diaz, ENIEF 2009 ([Toro et al., 2009](#)).

¹En este trabajo se propone un modelo mesoscópico que permite considerar la pérdida de resistencia de elementos estructurales de hormigón armado por el deterioro producido debido a la expansión de las barras longitudinales de acero. Esta expansión es causada por efecto de la corrosión de las barras. El tema está vinculado al problema multiescala tratado en la tesis ya que, a parte de utilizar similares modelos constitutivos fenomenológicos, falla de materiales, técnicas numéricas, etc.; se aplica una metodología donde un problema (viga de hormigón armado) obtiene información (daño) a partir de medias (homogeneización) de otra escala, definida, en este caso, por la sección transversal de la viga.

- *Modelos Constitutivos para Hormigones: 1. Modelo fenomenológico de daño-plástico y 2. Ideas preliminares de modelo multi-escala*, A. Huespe, X. Oliver, P.J. Sánchez y S. Toro, I Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales (Huespe et al., 2010).
- *Diseño óptimo de materiales para piezas sujetas a esfuerzos termo-mecánicos*, V. Fachinotti, S. Toro y P. Sánchez, ENIEF 2013, (Fachinotti et al., 2013)².

9.5. Líneas de investigación a futuro

Las opciones para continuar trabajando en la temática del modelado multiescala de materiales son muy amplias. A continuación enumeramos algunas que vislumbramos como viables en el corto y mediano plazo:

- Realizar simulaciones numéricas de validación en estructuras macroscópicas de interés ingenieril.
- Considerar tipologías microestructurales que se correspondan a materiales de importante uso tecnológico, como por ejemplo: aleaciones metálicas, cerámicos, polímeros, hormigones, etc.
- Estudiar y desarrollar, dentro del contexto multiescala propuesto, diferentes alternativas para regularizar el comportamiento inestable micromecánico, como por ejemplo: modelo de fisura cohesiva a nivel micro, esquemas de alto orden o gradientes, etc.
- Extender todos los conceptos introducidos al contexto general de grandes deformaciones.
- Explotar las potencialidades que ofrecen los modelos de orden reducido para disminuir drásticamente el esfuerzo de cálculo que insumen las formulaciones multiescalas basadas en el concepto de RVE.
- Finalmente mencionamos que, a partir de los estudios y discusiones derivadas del trabajo presente, hemos podido ampliar nuestro entendimiento y campo de aplicación en relación al modelado multiescala de materiales. Así, actualmente estamos trabajando en la formulación de técnicas multiescala en problemas térmicos con generación de calor interna y problemas termomecánicos.

²En este trabajo se utilizan técnicas multiescalas clásicas para obtener el comportamiento homogeneizado, mecánico y térmico, débilmente acoplado. Las aplicaciones involucran el diseño óptimo de microestructuras heterogéneas.

Bibliografía

- Aifantis E. On the microstructural origin of certain inelastic models. *ASME J. Engrg Mat. Tech.*, 106:326–334, 1984a.
- Aifantis E. On the role of gradients in the localization of deformation and fracture. *J. Engrg Sci.*, 30:1279–1299, 1984b.
- Anderson T. *Fracture Mechanics, Fundamentals and Applications*. 2nd, Edition, CRC press, London, 1995.
- Barenblatt G. The mathematical theory of equilibrium of cracks in brittle fracture. *Adv. Appl. Mech.*, 7:55–129, 1962.
- Bažant Z., Belytschko T., y Chang T. Continuum theory for strain softening. *ASCE J. Engrg Mech.*, 110:1666–1692, 1984.
- Bažant Z. y Lin F. Non-local yield limit degradation. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 26:1805–1823, 1988.
- Bažant Z. y Pijaudier-Cabot G. Nonlocal continuum damage, localization instability and convergence. *ASME J. Appl. Mech.*, 55(2):287–293, 1988.
- Bažant Z. y Planas J. *Fracture and size effect in concrete and other quasibrittle materials*. CRC Press, Boca Raton, FL, 1998.
- Belytschko T., Chen H., Xu J., y Zi G. Dynamic crack propagation based on loss of hyperbolicity and a new discontinuous enrichment. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 58:1873–1905, 2003.
- Belytschko T., Loehnert S., y Song J.H. Multiscale aggregating discontinuities: A method for circumventing loss of material stability. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 73:869–894, 2008.
- Belytschko T., Moës N., Usui S., y Parimi C. Arbitrary discontinuities in finite elements. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 50:993–1013, 2001.
- Böhm H. Short introduction to basic aspects of continuum micromechanics. Informe Técnico ILSB Report 206, Institute of Lightweight Design and Structural Biomechanics (ILSB) Vienna University of Technology, 2013.
- Christensen R. y Lou K. Solutions for effective shear properties in three phase sphere and cylinder models. *J. Mech. Phys. Solids*, 27:315–330, 1979.
- Coenen E.W.C., Kouznetsova V.G., y Geers M.G.D. Novel boundary conditions for strain localization analyses in microstructural volume elements. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 90(1):1–21, 2012a.
- Coenen E.W.C., Kouznetsova V.G., y Geers M.G.D. Novel boundary conditions for strain localization analyses in microstructural volume elements. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 90:1–21, 2012b. DOI: 10.1002/nme.3298.
- de Borst R. Simulation of strain localization: A reappraisal of the cosserat continuum. *Eng. Comput.*, 8:317–332, 1991.
- de Borst R. A generalisation of j2-flow theory for polar continua. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 103:347–362, 1993.
- de Borst R. y Mühlhaus H. Gradient-dependent plasticity: formulation and algorithmic aspects. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 35(3):521–539, 1992.
- de Borst R., Pamin J., Peerlings R., y Sluys L. On gradient-enhanced damage and plasticity models for failure in quasi-brittle and frictional materials. *Comp. Mech.*, 17:130–141, 1995.
- De Souza Neto E. y Feijóo R. Variational foundation on multi-scale constitutive models of solids: small and large strain kinematical formulation. *LNCC Research & Development Report No 16*, 2006.
- De Souza Neto E. y Feijóo R. On the equivalence between spatial and material volume averaging of stress in large strain multi-scale solid constitutive models. *Mechanics of Materials*, 40:803–811, 2008.
- De Souza Neto E. y Feijóo R. Variational foundations of large strain multiscale solid constitutive models: Kinematical formulation. En M. Vaz, E. De Souza Neto, y P. Muñoz-Rojas, editores, *Advanced Computational Materials Modeling. From Classical to Multi-Scale Techniques*, páginas 341–378. Weinheim, 2011.
- Dias I. *Strain Injection Techniques in Numerical Modeling of Propagating Material Failure*. Tesis de Doctorado, Universitat Politècnica de Catalunya, ETSPCCB, Departament RMEE, Barcelona, España, 2012.
- Dugdale D. Yielding of steel sheets containing slits. *J. Mech. Phys. Solids*, 8:100–108, 1960.

- Elices M., Guinea G., Gómez J., y Planas. J. The cohesive zone model: advantages, limitations and challenges. *Engineering Fracture Mechanics*, 69:137–163, 2002.
- Eshelby J. The determination of the field of an ellipsoidal inclusion and related problems. *Proc. R. Soc. Lond A*, 241:376–396, 1957.
- Etse G. y Nieto M. Micropolar regularization in concrete pasticity. En *Fourth World Congress on Computational Mechanics*. Springer Verlag, Buenos Aires, 1998.
- Fachinotti V., Toro S., y Sánchez P. Diseño óptimo de materiales para piezas sujetas a esfuerzos termo-mecánicos. En C.G.G. Garino, A.E. Mirasso, M.A. Storti, y M.E. Tornello, editores, *Mecánica Computacional Vol. XXXII*, páginas 425–438. ENIEF 2013, AMCA, Mendoza, Argentina, 2013.
- Feist C. y Hofstetter G. Computational aspect of concrete fracture simulations in the framework of the sda. En *Fracture Mechanics of Concrete Structures FRAMCOS*. Vale, Co, USA, 2004.
- Feyel F. A multilevel finite element method (FE²) to describe the response of highly non-linear structures using generalized continua. *Comput. Meth. App. Mech. Eng.*, 192:3233–3244, 2003.
- Feyel F. y Chaboche J.L. FE² multiscale approach for modelling the elastoviscoplastic behaviour of long fibre sic/ti composite materials. *Comput. Meth. App. Mech. Eng.*, 183(3-4):309 – 330, 2000. ISSN 0045-7825. doi:http://dx.doi.org/10.1016/S0045-7825(99)00224-8.
- Geers M., Kouznetsova V., y Brekelmans W. Multi-scale computational homogenization: Trends and challenges. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 234:2175–2182, 2010.
- Gitman I., Askes H., y Sluys L. Representative volume: Existence and size determination. *Engineering Fracture Mechanics*, 74:2518–2534, 2007.
- Giusti S., Blanco P., De Souza Neto E., y Feijóo R. An assessment of the gurson yield criterion by a computational multi-scale approach. *Engineering Computations: International Journal for Computer-Aided Engineering and Software*, 26(3):281–301, 2009.
- Guidault P., Allix O., Champaney L., y Navarro J. A two-scale approach with homogenization for the computation of cracked structures. *Computers and Structures*, 85(17-18):1360–1371, 2007.
- Gurson A. Continuum theory of ductile rupture by void nucleation and growth - Part I: Yield criteria and flow rules for porous ductile media. *J. Engng. Materials Technol. ASME*, 99:2–15, 1977.
- Hashin Z. The elastic moduli of heterogeneous materials. *J. Appl. Mech.*, 29:143–150, 1962.
- Hashin Z. Analysis of composite materials. A survey. *J. Appl. Mech.*, 50:481–505, 1983.
- Hashin Z. y Shtrikman S. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 11:127–140, 1963.
- Hill R. Accelerations waves in solids. *J. Mech. Phys. Solids*, 10:1–16, 1962.
- Hill R. A self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 13:213–222, 1965.
- Hillerborg A., Modeer M., y Petersson P. Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements. *Cement and concrete research*, 6(6):163–168, 1976.
- Huespe A. y Oliver J. Crack models with embedded discontinuities. En G. Hofstetter y G. Meschke, editores, *Numerical Modeling of Concrete Cracking*, páginas 99–159. CISM, Courses & Lectures 532, SpringerWienNewYork, 2011.
- Huespe A., Oliver X., Sánchez P., y Toro S. Modelos constitutivos para hormigones: 1. modelo fenomenológico de daño-plástico y 2. ideas preliminares de modelo multi-escala. I Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales, Buenos Aires, Argentina, 2010. Presentación.
- Jirásek M. Comparative study on finite elements with embedded discontinuities. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 188:307–330, 2000.
- Jirásek M. y Bauer M. Numerical aspects of the crack band approach. *Computers & Structures*, 110-111:60–78, 2012. ISSN 0045-7949. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.compstruc.2012.06.006.
- Kulkarni M., Geubelle P., y Matous K. Multi-scale modeling of heterogeneous adhesives: Effect of particle decohesion. *Mechanics of Materials*, 41:573–583, 2009.
- Lasry D. y Belytschko T. Localization limiters in transient problems. *Int. J. Solids Struct.*, 24:581–597, 1988.
- Linder C. y Armero F. Finite elements with embedded strong discontinuities for the modeling of failure in solids. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 72:1391 – 1433, 2007.
- Lloberas-Valls O. *Multiscale domain decomposition analysis of quasi-brittle materials*. Tesis de Doctorado, Faculty of Civil Engineering and Geosciences at Delft University of Technology., 2013. PhD. Thesis.
- Loret B. y Prévost J. Dynamic strain localization in elasto-(visco-)plastic solids, part 1. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 83:247–273, 1990.
- Mariani S. y Perego U. Extended finite element method for quasi-brittle fracture. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 58:103–126, 2003.
- Matous K., Kulkarni M., y Geubelle P. Multiscale cohesive failure modeling of heterogeneous adhesives. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 56:1511–1533, 2008.

- Miehe C. y Koch A. Computational micro-to-macro transition of discretized microstructures undergoing small strain. *Arch. Appl. Mech.*, 72:300–317, 2002.
- Miehe C., Schotte J., y Schröder J. Computational micro-macro transitions and overall moduli in the analysis of polycrystals at large strains. *Computational Materials Science*, 6:372–382, 1999.
- Miehe C., Schroder J., y Becker M. Computational homogenization analysis in finite elasticity: material and structural instabilities on the micro- and macro-scales of periodics composites and their interaction. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 191:4971–5005, 2002.
- Moës N., Sukumar N., Moran B., y Belytschko T. An extended finite element method (X-FEM) for two and three-dimensional crack modelling. En *ECCOMAS 2000*. Vienna University of Technology, Austria, ISBN 3-9501554-0-6, Barcelona, Spain, September 11-14, 2000.
- Mori T. y Tanaka K. Average stress in the matrix and average energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall.*, 21:571–574, 1973.
- Mosler J. y Meschke G. 3d modelling of strong discontinuities in elastoplastic solids: fixed and rotating localization formulations. *Int. J. Numer. Methods Engrg.*, 57:1553–1576, 2003.
- Muhlhaus H. y Vardoulakis I. The thickness of shear bands in granular materials. *Geotechnic*, 37:271–283, 1987.
- Needleman A. Material rate dependence and mesh sensitivity in localization problems. *Comp. Meth. Appl. Mech. Eng.*, 67:69–86, 1988.
- Nemat-Nasser S. y Hori M. *Micromechanics: Overall Properties of Heterogeneous Materials*. Elsevier, 1999.
- Nguyen V., Valls O., Stroeven M., y Sluys L. On the existence of representative volumes for softening quasi-brittle materials - a failure zone averaging scheme. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:3028–3038, 2010.
- Nguyen V.P., Lloberas-Valls O., Stroeven M., y Sluys L.J. Homogenization-based multiscale crack modelling: From micro-diffusive damage to macro-cracks. *Comput. Meth. App. Mech. Eng.*, 200:1220–1236, 2011.
- Oliver J. A consistent characteristic length for smeared cracking models. *Int. J. Num. Meth. Engrg.*, 28:461–474, 1989.
- Oliver J. On the discrete constitutive models induced by strong discontinuity kinematics and continuum constitutive equations. *Int. J. Solids Struct.*, 37:7207–7229, 2000.
- Oliver J., Cervera M., Oller S., y Lubliner J. Isotropic damage models and smeared crack analysis of concrete. En *N.B. et al. editor, SCI-C Computer Aided Analysis and design of concrete Structures*, páginas 945–957. Pineridge Press, Swansea, 1990.
- Oliver J., Dias I., y Huespe A. Crack-path field and strain-injection techniques in computational modeling of propagating material failure. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2014. ISSN 0045-7825. doi:<http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2014.01.008>.
- Oliver J. y Huespe A. Theoretical and computational issues in modelling material failure in strong discontinuity scenarios. *Comput. Meth. App. Mech. Eng.*, 193:2987–3014, 2004a.
- Oliver J., Huespe A., Blanco S., y Linero D. Stability and robustness issues in numerical modeling of material failure with the strong discontinuity approach. *Comput. Meth. App. Mech. Eng.*, 195(52):7093–7114, 2005.
- Oliver J., Huespe A., Cante J., y Díaz G. On the numerical resolution of the discontinuous material bifurcation problem. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 83:786–804, 2010.
- Oliver J., Huespe A., y Sánchez P. A comparative study on finite elements for capturing strong discontinuities: e-fem vs x-fem. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 195(37-40):4732–4752, 2006.
- Oliver J. y Huespe A.E. Continuum approach to material failure in strong discontinuity settings. *Comp. Meth. Appl. Mech. in Engrg.*, 193:3195–3220, 2004b.
- Oliver J., Huespe A.E., Pulido M.D.G., y Chaves E. From continuum mechanics to fracture mechanics: the strong discontinuity approach. *Engineering Fracture Mechanics*, 69:113–136, 2002.
- Ottosen N. y Runesson K. Properties of discontinuous bifurcation solutions in elasto-plasticity. *Int. J. Solids Structures*, 27(4):401–421, 1991.
- Peerlings R., de Borst R., Brekelmans W., y de Vree J. Gradient enhanced damage for quasi-brittle materials. *Int. J. Numer. Meth. Engrg.*, 39:3391–3403, 1996.
- Peerlings R., de Borst R., Brekelmans W., y Geers M. Localization issues in local and nonlocal continuum approaches to fracture. *European Journal of Mechanics A/Solids*, 21:175–189, 2002.
- Peerlings R., Geers M., de Borst R., y Brekelmans W. A critical comparison of nonlocal and gradient-enhanced softening continua. *Int. J. Solids Struct.*, 38:7723–7746, 2001.
- Perić D., De Souza Neto E., Feijóo R., Partovi M., y Molina A.C. On micro-to-macro transitions for multi-scale analysis of non-linear heterogeneous materials: unified variational basis and finite element implementation. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 87:149–170, 2011.
- Pijaudier-Cabot G. y Bažant Z. Nonlocal damage theory. *ASCE J. Engrg. Mech.*, 113(10):1512–1533, 1987.
- Pindera M., Khatam H., Drago A., y Bansal Y. Micromechanics of spatially uniform heterogeneous media: A

- critical review and emerging approaches. *Composites: Part B*, páginas 349–378, 2009.
- Planas J. y Elices M. Nonlinear fracture of cohesive material. *Int. J. of Fracture*, 51:139–157, 1992.
- Qu J. y Cherkaoui M. *Fundamentals of Micromechanics of Solids*. Wiley, 2006.
- Rice J. The localization of plastic deformation. En W. Koiter, editor, *Theoretical and Applied Mechanics, 14th IUTAM Congress*, páginas 207–220. Amsterdam, North-Holland, 1976.
- Rice J. y Rudnicki J. A note on some features of the theory of localization of deformation. *Int. J. Solids Structures*, 16:597–605, 1980.
- Rots J. *Computational modelling of concrete fracture*. Tesis de Doctorado, Delft University, Netherlands, 1988.
- Rots J., P. N., Kusters G.M.A., y Blaauwendraad T. Smearred crack approach and fracture localization in concrete. *HERON*, 1, 1985.
- Runesson K., Ottosen N., y Peric D. Discontinuous bifurcations of elastic-plastic solutions at plane stress and plane strain. *Int. J. of Plasticity*, 7:99–121, 1991.
- Sánchez P., Blanco P., Huespe A., y Feijóo R. Failure-oriented multi-scale variational formulation: Micro-structures with nucleation and evolution of softening bands. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 257:221–247, 2013. ISSN 0045-7825. doi:http://dx.doi.org/10.1016/j.cma.2012.11.016.
- Sánchez P., Huespe A., Oliver J., y Toro S. Mesoscopic numerical model to simulate degradation and ultimate load carrying capacity in reinforced concrete structures affected by corrosion. En A. Cardona, M. Storti, y C. Zuppa, editores, *Mecánica Computacional Vol. XXVIII*, páginas 1417–1437. ENIEF 2008, AMCA, San Luis, Argentina, 2008a.
- Sánchez P., Huespe A., Oliver J., y Toro S. Numerical modelling of the load carrying capacity degradation in concrete beams due to reinforcement corrosion. En *8th. World Congress on Computational Mechanics (WCCM8) and 5th. European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2008)*. Venice, Italy, 2008b. Artículo Breve.
- Sánchez P., Sonzogni V., Huespe A., y Oliver J. Stabilized mixed finite elements with embedded strong discontinuities for shear band modelling. *Journal of Applied Mechanics, Transaction ASME*, 73(6):995–1004, 2006.
- Sánchez P., Toro S., Blanco P., Huespe A., y Feijóo R. A variational multiscale model for fracture. En *6th European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering (ECCOMAS 2012)*. Vienna, Austria, 2012. Abstract.
- Sánchez P., Toro S., Huespe A., Guisti S., y Feijóo R. Variational multi-scale formulation for modelling material failure in heterogeneous solids. En *International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC 2011)*, páginas 223–223. Barcelona, Spain, 2011a. Abstract.
- Sánchez P.J. *Desarrollos en Mecánica Computacional de Falla Material. Aplicación a Modelos de Plasticidad y Daño*. Tesis de Doctorado, FICH-UNL, Santa Fe, Argentina, 2006.
- Sánchez P.J., Blanco P.J., Huespe A.E., y Feijóo R.A. Failure-oriented multi-scale variational formulation for softening materials. *LNCC Internal Report*, 2011b.
- Sánchez P.J., Huespe A.E., Oliver J., y Toro S. Mesoscopic model to simulate the mechanical behavior of reinforced concrete members affected by corrosion. *International Journal of Solids and Structures*, 47:559–570, 2010.
- Sancho J., Planas J., Reyes D.C.E., y Gálvez J. An embedded crack model for finite element analysis of concrete fracture. *Eng. Fract. Mech.*, 74:75–86, 2007.
- Simo J. y Hughes T. *Computational inelasticity*. Springer-Verlag, 1998.
- Simo J. y Ju J. Strain -and stress- based continuum damage models -ii formulation. *Int. J. Solids Struct.*, 23:841–869, 1987.
- Simo J. y Oliver J. A new approach to the analysis and simulation of strain softening in solids. En Z. Bažant, Z. Bittnar, M. Jirásek, y J. Mazars, editores, *Fracture and Damage in Quasi-brittle Structures.*, páginas 25–39. E & FN Spon, 1994.
- Sluys L., de Borst R., y Mühlhaus H. Wave propagation, localization and dispersion in a gradient-dependent medium. *Int. J. Solids Struct.*, 30:1153–1171, 1993.
- Song J.H. y Belytschko T. Multiscale aggregating discontinuities method for micro-macro failure of composites. *Composites, Part B* 40:417–426, 2009.
- Steinmann P. y Willam K. Localization within the framework of micropolar elasto-plasticity. En V.M. et al., editor, *Advances in continuum mechanics*, páginas 296–313. Springer Verlag, Berlin, 1991.
- Termizer I. *Micromechanics: Analysis of Heterogeneous Materials*. Department of Mechanical Engineering, Bilkent University, 2012.
- Thomas T. *Plastic flow and fracture in solids*. Academic Press, New York, 1961.
- Toro S., Huespe A., Oliver J., Sánchez P., y Diaz G. Desarrollo de un modelo constitutivo de daño-plástico para la simulación numérica de falla frágil-dúctil en el hormigón. En C.G. Bauza, P. Lotito, L. Parente, y M. Vénere, editores, *Mecánica Computacional Vol. XXVIII*, páginas 1093–1093. ENIEF 2009, AMCA, Tandil, Argentina, 2009. Resumen.

- Toro S., Sánchez P., Blanco P., Feijóo R., Guisti S., y Huespe A. A novel variational multi-scale formulation for softening materials. II Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales, Mar de Plata, Argentina, 2010a. Presentación.
- Toro S., Sánchez P., Blanco P., Feijóo R., Guisti S., y Huespe A. Una nueva formulación multi-escala variacionalmente consistente para materiales sujetos a falla y fractura. En O. Möller, J.W. Signorelli, y M.A. Storti, editores, *Mecánica Computacional Vol. XXX*, páginas 1887–1887. ENIEF 2011, AMCA, Rosario, Argentina, 2011. Abstract.
- Toro S., Sánchez P., Blanco P., Huespe A., y Feijóo R. Two-scale model for failure analysis of heterogeneous materials: numerical validation. En *The Third International Conference on Computational Modeling of Fracture and Failure of Materials and Structures (CFRAC 2013)*, páginas 228–228. Praga, República Checa, 2013a. Abstract.
- Toro S., Sánchez P., y Huespe A. Análisis numérico de un problema de deterioro estructural causado por la corrosión en las armaduras del hormigón armado. En *20° Jornadas Argentinas de Ingeniería Estructural*. Asociación de Ingenieros Estructurales, Buenos Aires, Argentina, 2008.
- Toro S., Sánchez P., Huespe A., Blanco P., Guisti S., y Feijóo R. Formulación multi-escala para modelar falla material: comparativa frente a dns. En *Mecánica Computacional Vol. XXXI*. MECOM 2012, AMCA, Salta, Argentina, 2012a. Abstract.
- Toro S., Sánchez P., Huespe A., Blanco P., Guisti S., y Feijóo R. Modelado de falla material mediante formulación multi-escala. III Workshop sobre Modelado Multiescala de Materiales, La Plata, Argentina, 2012b. Presentación.
- Toro S., Sánchez P., Huespe A., Blanco P., Guisti S., y Feijóo R. Modelo multiescala para falla material: Aplicaciones a microestructuras con distribución aleatoria de heterogeneidades y malla de elementos finitos generales. En C.G.G. Garino, A.E. Mirasso, M.A. Storti, y M.E. Tornello, editores, *Mecánica Computacional Vol. XXXII*, páginas 483–502. ENIEF 2013, AMCA, Mendoza, Argentina, 2013b.
- Toro S., Sánchez P., Huespe A., Guisti S., Blanco P., y Feijóo R. Formulación multi-escala para materiales cuasi-frágiles heterogéneos considerando generación y propagación de fisuras en la celda unitaria. Fundamentos cinemáticos-variacionales. En E. Dvorkin, M. Goldschmit, y M. Storti, editores, *Mecánica Computacional Vol. XXIX*, páginas 2917–2944. MECOM 2010, AMCA, Buenos Aires, Argentina, 2010b.
- Toro S., Sánchez P.J., Huespe A.E., Guisti S.M., Blanco P.J., y Feijóo R.A. A two-scale failure model for heterogeneous materials: numerical implementation based on the finite element method. *Int. J. Num. Meth. Eng.*, 2013c. Aceptado.
- Tvergaard V. Influence of voids on shear band instabilities under plane strain conditions. *Int. J. Fract.*, 17:389–407, 1981.
- Tvergaard V. y Hutchinson J. The relation between crack growth resistance and fracture process parameters in elasto-plastic solids. *J. of the Mech. Phys. Solids*, 40:1377–1397, 1992.
- Tvergaard V. y Needleman A. Effects of nonlocal damage in porous plastic solids. *Int. J. Solids Struct.*, 32(8/9):1063–1077, 1995.
- Verhoosel C.V., Remmers J.J.C., Gutiérrez M.A., y de Borst R. Computational homogenization for adhesive and cohesive failure in quasi-brittle solids. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83(8-9):1155–1179, 2010. ISSN 1097-0207. doi:10.1002/nme.2854.
- Willis J. Variational and related methods for the overall properties of composites. *Adv. Appl. Mech.*, 21:1–78, 1981.

Doctorado en Ingeniería
mención mecánica computacional

Título de la obra:

**Modelado de falla de materiales
mediante
formulaciones multiescala**

Autor: Sebastian Toro

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

modelado de materiales, falla material,
multiescala, RVE, FE²,
métodos numéricos y mecánica computacional.