

MODELO MULTIESCALA PARA FALLA MATERIAL: APLICACIONES A MICROESTRUCTURAS CON DISTRIBUCIÓN ALEATORIA DE HETEROGENEIDADES

Sebastian Toro^{a,b}, Pablo J. Sánchez^{a,b}, Alfredo E. Huespe^a, Pablo J. Blanco^c, Sebastián M. Giusti^d y Raúl A. Feijóo^c

^aCIMEC-UNL-CONICET, Güemes 3450, CP 3000, Santa Fe, SF, Argentina, www.cimec.org.ar.

^bGIMNI-UTN, Lavaise 610, CP 3000, Santa Fe, SF, Argentina, www.frfsf.utm.edu.ar.

^cLNCC, Avda. Gertulio Vargas 333, CEP 25651-075, Petrópolis, RJ, Brasil, www.lncc.br.

^dUTN-FRC/CONICET, M. M. Lopez esq. Cruz Roja Argentina, Ciudad Universitaria, CP 5016, Córdoba, Cba, Argentina, www.frc.utm.edu.ar.

Palabras Clave: formulaciones multiescala, localización de deformaciones, falla material, RVE con distribución arbitraria de poros, malla no uniforme.

Resumen. En trabajos previos recientes, los autores han desarrollado un modelo multiescala para el tratamiento de falla de materiales. Éste se basa en el concepto de *Volumen Representativo Elemental* (*Representative Volume Element*, RVE) y de *Homogeneización*, y resuelve en forma integral todo el proceso de degradación del material, abarcando la etapa estable e inestable del mismo. Para su resolución se aplica un esquema numérico del tipo FE² dotado de ingredientes adicionales importantes propios de la formulación multiescala propuesta.

En los modelos multiescala clásicos, cuando son aplicados a problemas que involucran falla material, no es posible encontrar un tamaño mínimo de la microcelda a partir del cual la respuesta homogeneizada poscrítica resulte insensible ante cambios de tamaño (pérdida de *objetividad* de la respuesta constitutiva). El modelo propuesto da una solución a este problema, obteniendo una respuesta objetiva en la etapa poscrítica. Para ello se debe capturar una zona a nivel micro, denominada *dominio localizado* (Ω_{μ}^L), donde se produce localización de deformaciones y que induce inestabilidad material a nivel macro. Este dominio se puede interpretar como la zona de falla, a nivel micro del RVE, que caracteriza cinemática y constitutivamente una fisura cohesiva a nivel macro.

La zona de falla resultante (Ω_{μ}^L) puede adquirir forma arbitraria, por lo tanto en este trabajo se muestran ejemplos donde se promueven modos de falla tortuosos. Para ello se modelan RVEs construidos a partir de una distribución geométrica aleatoria de poros elípticos, tanto en su posición como en la dirección del eje mayor. También se utilizan mallas de elementos finitos no uniformes que generan dominios discretos de localización aún más tortuosos.

Se describe además una generalización teórica del modelo propuesto anteriormente que permite obtener resultados consistentes en el caso de dominios muy generales en cuanto a la geometría capturada para el dominio de falla.

Con estos ejemplos numéricos, más complejos y generales a los mostrados anteriormente, se busca validar el modelo como una técnica viable para el modelado de falla de materiales mediante formulaciones multiescala basadas en el concepto de RVE.

1. INTRODUCCIÓN

El modelado de falla de materiales heterogéneos tiene una gran importancia ingenieril y tecnológica. Debido a ello en el ámbito científico se realizan continuos esfuerzos para modelar adecuadamente todo el proceso de degradación material. La aplicación de técnicas multiescalas para capturar falla material es relativamente reciente, y surge como una alternativa a los modelos constitutivos fenomenológicos.

En trabajos previos recientes (Sánchez et al., 2011b, 2013; Toro et al., 2013b) los autores han publicado un modelo multiescala para simular falla material. Dicha formulación también se ha presentado en ediciones anteriores del presente congreso (Toro et al., 2011, 2012) y en congresos internacionales (Sánchez et al., 2011a, 2012; Toro et al., 2013a). El modelo se basa en el concepto de Homogeneización y en la existencia de un RVE (*Representative Volume Element*, Gitman et al. (2007)).

Debe mencionarse que la aplicación directa de un *Modelo Multiescala Clásico*, tal como la presentada en Miehe y Koch (2002), a microestructuras susceptibles de presentar inestabilidad material no garantiza la existencia de un tamaño microestructural físicamente representativo (pérdida de *objetividad*) y, por lo tanto, se pierde la noción de RVE. Con el modelo propuesto es posible obtener una respuesta objetiva, satisfaciendo además consistencia energética y congruencia con resultados obtenidos mediante la utilización de técnicas DNS (*Direct Numerical Simulation*).

En el artículo presente se propone una generalización teórica de la metodología multiescala inicial que posibilita resolver microestructuras con modos de fallo más complejos y tortuosos. Para ello se adopta el mismo procedimiento axiomático-variacional original, pero redefiniendo en forma adecuada la transferencia de información cinemática desde la escala macro hacia la escala micro (operador de inserción). A lo largo del trabajo se demuestra que la simple introducción de esta hipótesis a nivel cinemático, permite obtener una formulación multiescala con mejoras sustanciales de modelación, y al mismo tiempo conservar todo el formalismo teórico de base, ya discutido en las contribuciones previas.

2. MODELO COHESIVO EN LA MACROESCALA

Durante la etapa del comportamiento estable del material se asume que la escala macro está constituida por un medio continuo y estadísticamente homogéneo, y que el estado mecánico de un punto \mathbf{x} está caracterizado por la variable cinemática de deformación $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ y el estado de tensión correspondiente $\boldsymbol{\sigma}$ (Fig. 1). En el contexto de pequeñas deformaciones, la compatibilidad cinemática a nivel macro exige la siguiente relación entre los desplazamientos \mathbf{u} y las deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}_R$:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_R = \nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s \mathbf{u} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega \setminus \mathcal{S} \quad (1)$$

donde el subíndice \mathbf{x} en el operador gradiente $\nabla_{\mathbf{x}}$ implica que la operación está asociada al sistema coordenado definido en la macroescala. La operación $\nabla_{\mathbf{x}} \otimes^s (\bullet)$ representa el gradiente simétrico de (\bullet) .

Cada punto \mathbf{x} en la escala macro tiene asociado una porción representativa de material heterogéneo (microescala). Cuando el material se ha deteriorado lo suficiente (acumulación de micromecanismos de falla) se produce un fenómeno de localización de deformaciones, hasta alcanzar un punto crítico (instante de bifurcación). Este instante se denomina t_N , y se determina a partir de un análisis de bifurcación (Rudnicki y Rice, 1975; Rice, 1976; Runesson et al., 1991) sobre el tensor tangente homogeneizado (Sánchez et al., 2013; De Souza Neto y Feijóo, 2006). En estas circunstancias se activa una fisura cohesiva macro, denominada \mathcal{S} .

El estado mecánico de dicha fisura está caracterizado por una variable cinemática de salto β , un esfuerzo de tracción T y su normal n (Fig. 1). Para modelar esta etapa poscrítica se utiliza una cinemática de discontinuidades fuertes, donde el salto β representa la discontinuidad de desplazamientos u sobre S , es decir:

$$\beta = \llbracket u \rrbracket_S \tag{2}$$

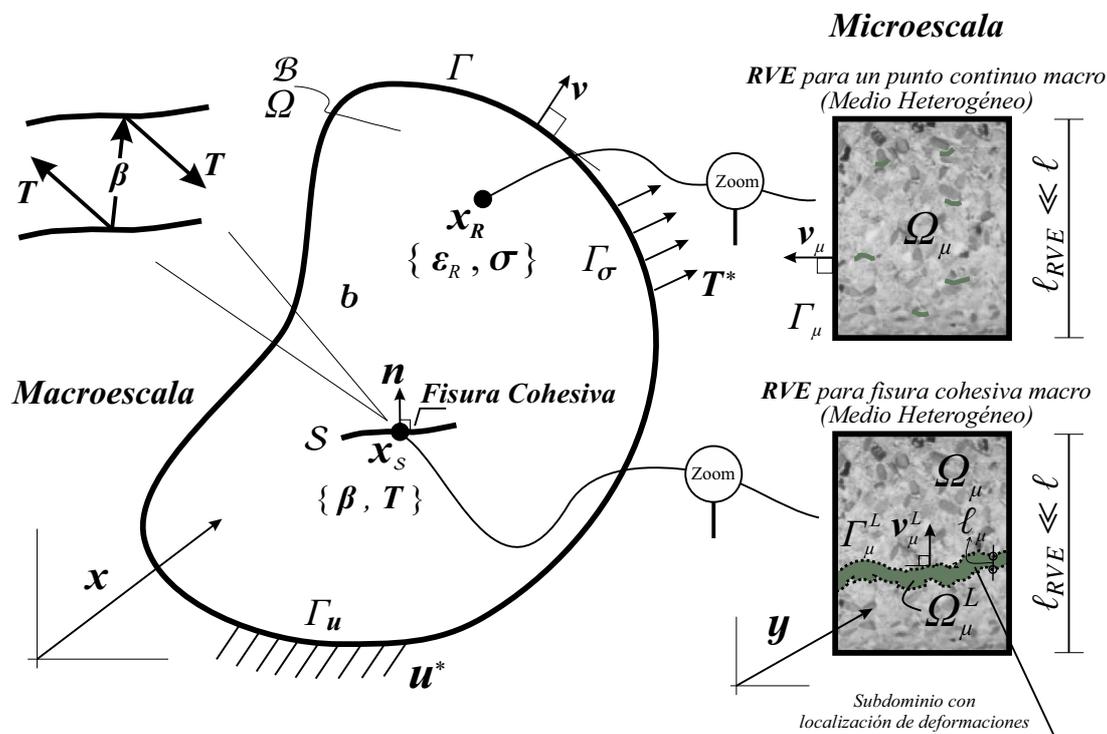


Figura 1: Idealización en la macro y microescala para análisis de la falla de materiales con multiscala.

Para los detalles específicos sobre la resolución del problema mecánico con cinemática de discontinuidades fuertes en la escala macro referirse a [Simo y Oliver \(1994\)](#) y [Sánchez et al. \(2011b, 2013\)](#). En forma resumida lo que se resuelve es el equilibrio convencional variacional de tensiones en $\Omega \setminus S$ y el equilibrio de tracciones ($T - \sigma \cdot n = 0$) sobre la fisura S . En este esquema mecánico adoptado las variables duales que producen potencia en el dominio $\Omega \setminus S$ son $\{\sigma, \epsilon_R\}$, mientras que sobre la fisura S son $\{T, \beta\}$ (Fig. 1).

Para la solución del problema de equilibrio macro es necesario conocer la relación constitutiva entre los esfuerzos internos (σ y T) y las variables cinemáticas (ϵ_R y β). Con el modelo cohesivo adoptado en la macroescala, en los puntos $x \in \Omega \setminus S$ es necesario encontrar la relación $\sigma = \sigma(\{\epsilon_R\}^t)$ y para los puntos $x \in S$ la relación $T = T(\{\beta\}^t)$. Con $\{(\bullet)\}^t$ se indica la historia de la variable (\bullet) hasta el instante t .

Los modelos desarrollados en este trabajo tienen justamente el fin de definir mediante formulaciones multiscala esas relaciones, es decir utilizar las respuestas homogeneizadas como las de un modelo constitutivo. Parra ello cada punto x de la macroescala se vincula a una microcelda heterogénea (Fig. 1) y la respuesta homogeneizada se obtiene a partir de la resolución de un problema mecánico en la microescala.

3. FORMULACIÓN MULTIESCALA PARA FALLA DE MATERIALES

3.1. Preliminares

En esta contribución se generaliza el modelo propuesto en (Sánchez et al., 2011b, 2013) para considerar el caso general donde el dominio de falla micro adquiere forma arbitraria, producto de la propia evolución de la degradación microestructural.

El tratamiento de la respuesta constitutiva se divide en dos regímenes (Fig. 1), una previa a la bifurcación macroscópica ($t < t_N$) y una posterior a la misma ($t > t_N$). Para todo punto \mathbf{x} de la macroescala y para $t < t_N$, se utiliza el modelo descrito en la Sec. 3.2. El estado mecánico de este punto está definido por su estado de tensión $\boldsymbol{\sigma}$ y de deformación $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ (Sec. 2), por ello son éstas las variables de la macroescala que se ponen en juego al proponer la técnica de salto de escala (términos duales que producen potencia interna). Luego del instante t_N , en que se detecta bifurcación en el punto, se activa una macrofisura \mathcal{S} . Por lo tanto, las variables que definen el estado mecánico del punto en la (Sec. 2) son la tracción \mathbf{T} y el salto $\boldsymbol{\beta}$ (términos duales que producen de potencia interna). Esto se tiene en cuenta en el modelo multiescala propuesto (Sec. 3.3), definiendo adecuadamente la inserción del salto en la escala micro. A partir de ello se deduce qué características hereda el problema micromecánico y cómo se homogeneiza la tracción cohesiva. Como requisito fundamental esta respuesta constitutiva debe ser independiente del tamaño de la microcelda, y así conservar el concepto de RVE en la etapa inestable del material.

Para la formulación de modelo multiescalas se postulan tres hipótesis fundamentales, a saber: (i) la definición de la *Cinemática micro*, (ii) la *Admisibilidad Cinemática (Homogeneización de las deformaciones)*, y (iii) la *Admisibilidad Energética (Principio de Hill-Mandel)*. El fundamento de estas hipótesis generales fue tratado en Sánchez et al. (2011b, 2013).

En las secciones siguientes se indica con el símbolo Ω_μ el dominio completo de la microcelda y su medida (volumen) con $|\Omega_\mu|$. La frontera del mismo se identifica con Γ_μ y el versor normal saliente con \mathbf{v}_μ (ver Fig. 1). El dominio de la zona de falla a nivel micro se denomina dominio localizado, Ω_μ^L , y su medida se simboliza con $|\Omega_\mu^L|$. La frontera de Ω_μ^L se representa con Γ_μ^L y el correspondiente versor normal saliente con \mathbf{v}_μ^L (ver Fig. 1). Los puntos en la escala micro, y también el sistema coordenado a este nivel, se denotan con el símbolo \mathbf{y} .

Debido a que el modelo que se desarrolla a continuación propone un cambio en las condiciones de borde en la microescala (Sec. 3.3.2), durante el proceso de deterioro del material, es conveniente escribir todas las ecuaciones en forma incremental. Para ello se utiliza el símbolo (\bullet) para indicar el incremento infinitesimal de la variable (\bullet) .

3.2. Modelo Multiescala para la etapa estable del material ($\Omega \setminus \mathcal{S}$)

En esta sección se define el modelo multiescala para los puntos \mathbf{x} de la macroescala donde no se detecta inestabilidad ($t < t_N$), abarcando todos los puntos que están sobre el dominio $\Omega \setminus \mathcal{S}$.

Como se explicó previamente, en estos puntos solo interesan las variables $\boldsymbol{\varepsilon}_R$ y $\boldsymbol{\sigma}$, y se requiere obtener una relación constitutiva (Sec. 2).

3.2.1. Cinemática micro

La cinemática que se asume en la microescala en esta etapa, escrita en forma incremental, es:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \mathcal{I}_y(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R) + \dot{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu \quad (3)$$

donde se utiliza la definición de un operador de inserción \mathcal{I}_y y $\dot{\hat{\epsilon}}_\mu$ es la componente fluctuante de la deformación micro.

El operador \mathcal{I}_y se lo define como:

$$\mathcal{I}_y(\underline{\bullet}) = (\underline{\bullet}) \quad \forall y \in \Omega_\mu \quad (4)$$

donde con el subíndice y se indica la dependencia de la inserción con la posición.

Los operadores de inserción son una forma concisa de indicar cómo se aplica la variable cinemática macro dentro del dominio de la microescala Ω_μ . Este esquema permite generalizar el desarrollo de modelos multiescala, facilitando la presentación de los conceptos introducidos en la definición del modelo multiescala en la etapa inestable del material (Sec. 3.3). En particular, en la Ec. (3) se usa para indicar que se distribuye en forma uniforme el incremento de deformación regular $\dot{\epsilon}_R$ en todo el dominio Ω_μ .

A partir de las Ecs. (3) y (4), el incremento de deformación micro adquiere la forma convencionalmente utilizada:

$$\dot{\epsilon}_\mu = \dot{\epsilon}_R + \dot{\hat{\epsilon}}_\mu \quad (5)$$

Las variaciones cinemáticamente admisibles de las deformaciones micro $\hat{\epsilon}_\mu$ resultan:

$$\hat{\epsilon}_\mu = \mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) + \hat{\tilde{\epsilon}}_\mu = \hat{\epsilon}_R + \hat{\tilde{\epsilon}}_\mu \quad (6)$$

donde el símbolo $(\hat{\bullet})$ representa todas las variaciones cinemáticamente admisibles de (\bullet) .

En la microescala se acepta la existencia de un campo de desplazamientos micro fluctuante \tilde{u}_μ que satisface la compatibilidad de deformaciones con el campo de deformaciones fluctuantes $\tilde{\epsilon}_\mu$:

$$\tilde{\epsilon}_\mu = \nabla_y \otimes^s \tilde{u}_\mu \quad (7)$$

donde el subíndice y en el operador gradiente ∇_y implica que la operación está asociada al sistema coordenado micro.

3.2.2. Admisibilidad Cinemática

Cada procedimiento de inserción de cinemática macro conlleva asociado un requerimiento de admisibilidad cinemática. En este caso, como la única variable cinemática existente es ϵ_R , que se distribuye en todo dominio Ω_μ de la microcelda, se incorpora la restricción dada por la Ec. (8). Ésta implica que la integral de la deformación macro $\mathcal{I}_y(\dot{\epsilon}_R)$ insertada es igual a la integral de la deformación micro en ese dominio¹. La Ec. (8) es una forma equivalente de escribir la hipótesis clásica de homogeneización de deformaciones.

$$\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(\dot{\epsilon}_R) d\Omega = \int_{\Omega_\mu} \dot{\epsilon}_\mu d\Omega \quad (8)$$

Si en la Ec. (8) se tiene en cuenta la cinemática adoptada (Ec. (5)) y la compatibilidad de deformaciones en el campo fluctuante (Ec. (7)), se puede escribir:

$$\int_{\Omega_\mu} \dot{\hat{\epsilon}}_\mu d\Omega = \int_{\Omega_\mu} \nabla_y \otimes^s \dot{\tilde{u}}_\mu d\Omega = \mathbf{0} \quad (9)$$

¹Si se multiplica ambos miembros de la Ec. (8) por $\frac{1}{|\Omega_\mu|}$, es posible interpretar esta restricción como una equivalencia entre las medias (asociadas al dominio Ω_μ) de la deformación $\mathcal{I}_y(\dot{\epsilon}_R)$ insertada desde la macroescala y la deformación en la microescala $\dot{\epsilon}_\mu$.

Resulta conveniente expresar la restricción anterior (Ec. (9)) en función del campo de desplazamiento micro fluctuante $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$. Para ello se aplica el Teorema de Stokes Generalizado al producto tensorial²:

$$\int_{\Gamma_\mu} \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (10)$$

Las Ec. (10) permite definir el espacio solución \mathcal{U}_μ y el de variaciones cinemáticamente admisibles \mathcal{V}_μ , para el campo de los desplazamientos fluctuantes micros durante la etapa estable:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu) &= \left\{ \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \mid \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \\ \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \mid \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \end{aligned} \quad (11)$$

donde \mathbf{H} es el espacio de funciones de Hilbert y \mathbf{H}^1 , el espacio con al menos la primera derivada cuadrado integrable.

En los espacios \mathcal{U}_μ y \mathcal{V}_μ se asume implícitamente que, además de las restricciones mencionadas, tienen incorporadas las necesarias para restringir el movimiento como cuerpo rígido de la celda unitaria³.

Los espacios definidos en la Ec. (11) contienen las restricciones cinemáticas mínimas que se requieren para garantizar la admisibilidad cinemática (Ec. (8)). Por ese motivo se lo denomina como submodelo de *Mínima Restricción*. No obstante, se pueden seleccionar subespacios más restringidos (por ejemplo, el submodelo de *Taylor, Lineal, Periódico*, etc.) según el tipo de problema y las características de la microcelda (De Souza Neto y Feijóo, 2006). En Toro et al. (2013b) se detalló un procedimiento general para imponer condiciones de borde en problemas multiescalas, en el contexto del método de elementos finitos.

Considerando la Ec. (7) y la Ec. (11) se puede definir el espacio de variaciones admisibles, \mathcal{D}_μ , para el campo de las deformaciones fluctuantes virtuales ($\hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu$):

$$\mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu \mid \hat{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu = \nabla_y \otimes^s \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \wedge \hat{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \right\} \quad (12)$$

Debido a la hipótesis de compatibilidad de deformaciones (Ec. (7)), es equivalente el uso de los espacios \mathcal{V}_μ ó \mathcal{D}_μ . El sentido de introducir el espacio \mathcal{D}_μ es para escribir el problema variacional en forma más compacta.

3.2.3. Admisibilidad energética

Como un aporte significativo de la contribución presente se postula una definición generalizada del el Principio de Hill-Mandel. Para el cual el régimen estable del material puede

²En particular la expresión en este caso es: $\int_\Omega \frac{\partial v_i}{\partial y_j} d\Omega = \int_\Gamma v_i v_j d\Gamma$, ó en su forma invariante, considerando el operador simétrico, como: $\int_\Omega \nabla \otimes^s v d\Omega = \int_\Gamma v \otimes^s \mathbf{v} d\Gamma$.

³En los modelos constitutivos multiescalas las restricciones por movimiento rígido de la celda unitaria usualmente son homogéneas, por lo que, sin pérdida de generalidad, en el análisis de este trabajo así se asumen.

expresarse como sigue⁴:

$$\sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) d\Omega \right) = \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu(\{\epsilon_\mu\}^t) : \hat{\epsilon}_\mu d\Omega \quad (13)$$

$$\forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \text{ cinemáticamente admisible}$$

donde $\hat{\epsilon}_\mu$ fue definido en forma general en la Ec. (6). Mediante la nomenclatura $\{\epsilon_\mu\}^t$ se indica que la tensión σ_μ depende de toda la historia de la deformación ϵ_μ . Con \mathcal{S} se indica el espacio de los todos tensores simétricos de segundo orden.

Este principio variacional asegura equivalencia energética (en términos de potencia interna) entre un punto en la macroescala y en la microcelda.

Teniendo en cuenta la Ec. (6), el Principio de Hill-Mandel (Ec. (13)) se reescribe de la forma:

$$\sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) d\Omega \right) = \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \left(\mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) + \hat{\epsilon}_\mu \right) d\Omega \quad \forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \quad (14)$$

Utilizando la definición del operador de inserción \mathcal{I}_y (ver Ec. (4)) en la ecuación anterior y resolviendo las integrales se deduce:

$$\sigma : \hat{\epsilon}_R = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \left(\int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu d\Omega \right) : \hat{\epsilon}_R + \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\epsilon}_\mu d\Omega \quad \forall \hat{\epsilon}_R \in \mathcal{S}, \forall \hat{\epsilon}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \quad (15)$$

La Ec. (15) representa un expresión variacional, la que se debe satisfacer para toda variación admisible de las variables independientes. Asumiendo en primera instancia que $\hat{\epsilon}_\mu$ se mantiene fija en cero, y que $\hat{\epsilon}_R$ adquiere valores arbitrarios, se obtiene la fórmula de homogeneización de tensiones:

$$\sigma = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu d\Omega \quad (16)$$

Como es de interés escribir las ecuaciones en forma incremental, la ecuación anterior se descompone considerando un diferencial de tiempo dt :

$$\sigma^{t-dt} + \dot{\sigma} dt = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \left(\sigma_\mu^{t-dt} + \dot{\sigma}_\mu dt \right) d\Omega \quad (17)$$

Si hasta el instante el $(t - dt)$ se verifica el Principio de Hill-Mandel se obtiene la fórmula de homogeneización de tensiones en forma incremental:

$$\dot{\sigma} = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \dot{\sigma}_\mu(\{\epsilon_\mu\}^t) d\Omega \quad (18)$$

donde las tensiones macroscópicas actuales se obtienen como:

$$\sigma = \sigma^{t-dt} + \dot{\sigma} dt \quad (19)$$

⁴Una manera de interpretar el Principio de Hill-Mandel es escribirlo de la siguiente forma:

$$\frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma : \mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R) d\Omega = \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\epsilon}_\mu d\Omega$$

donde se igualan la media en todo el dominio Ω_μ de la potencia virtual ejercida por una tensión generalizada σ sobre la deformación insertada $\mathcal{I}_y(\hat{\epsilon}_R)$, dependiente de la variable a nivel macro que produce potencia, con la media en el mismo dominio de la potencia virtual a nivel micro.

y el incremento de la tensión en la microescala, como:

$$\dot{\sigma}_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) = \frac{\sigma_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) - \sigma_\mu^{t-dt}}{dt} \quad (20)$$

En segunda instancia se considera en la Ec. (15) que $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R$ es nula y variaciones admisibles de $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$, obteniendo:

$$\int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \, d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu(\Omega_\mu) \quad (21)$$

La expresión previa representa el equilibrio mecánico en la microescala (en particular uno autoequilibrado). Considerando (7) y el formato incremental adoptado en este trabajo⁵, el problema micromecánico puede enunciarse en forma equivalente como sigue:

Hallar $\hat{\boldsymbol{u}}_\mu \in \mathcal{U}_\mu(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} \dot{\sigma}_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) : \nabla_{\boldsymbol{y}} \otimes^s \hat{\boldsymbol{u}}_\mu \, d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{u}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu(\Omega_\mu) \quad (22)$$

Notar que en este formato general propuesto se recupera el *Modelo Multiescala Clásico*, usado ampliamente en la resolución de problemas de modelado materiales estables (De Souza Neto y Feijóo, 2006).

3.3. Modelo multiescala para fisura cohesiva \mathcal{S} en la macroescala

Para un punto \boldsymbol{x} en la macroescala en donde se detecta inestabilidad material se activa el modelo cohesivo, como explicado en la Sec. 2. En ese instante (t_N) comienza evolucionar la variable cinemática $\boldsymbol{\beta}$ y, en función de ella, se requiere obtener una respuesta constitutiva $\boldsymbol{T} = \boldsymbol{T}(\{\boldsymbol{\beta}\}^t)$ a partir de la formulación multiescala que se propone y que defina el comportamiento material del punto.

El esfuerzo cohesivo \boldsymbol{T} es una magnitud dual al salto macro $\boldsymbol{\beta}$, con lo cual para su determinación sólo hace falta considerar variaciones virtuales $\hat{\boldsymbol{\beta}}$. La deformación regular influye en el cálculo de \boldsymbol{T} (Simo y Oliver, 1994; Sánchez et al., 2013) actuando simplemente como un argumento funcional, por lo tanto no hay necesidad de considerar variaciones virtuales de la deformación macro $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R$.

3.3.1. Cinemática en la microescala

La cinemática que se asume en la microescala, escrita en forma incremental, es:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \boldsymbol{I}_y^*(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R, \dot{\boldsymbol{\beta}}) + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (23)$$

donde \boldsymbol{I}_y^* es un operador de inserción que se define de la siguiente forma:

$$\boldsymbol{I}_y^*(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R, \dot{\boldsymbol{\beta}}) = \boldsymbol{I}_y(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R) + \boldsymbol{I}_y^L(\dot{\boldsymbol{\beta}}) \quad (24)$$

Notar que se utiliza el mismo concepto de operador de inserción, definido en la Sec. 3.2.1, permitiendo en forma abstracta generalizar la definición cinemática. Los operadores de inserción \boldsymbol{I}_y y \boldsymbol{I}_y^L utilizados en la Ec. (24) se definen como:

$$\boldsymbol{I}_y(\underline{\bullet}) = (\underline{\bullet}) \quad \forall \boldsymbol{y} \in \Omega_\mu \quad (25)$$

⁵Para ello, como en la Ec. (18), se considera que el Principio de Hill-Mandel se satisface hasta el instante ($t - dt$), y por lo tanto se cumple que $\int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu^{t-dt} : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \, d\Omega = 0$, $\forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu$, o en forma equivalente que el problema micro está en equilibrio en el instante ($t - dt$).

$$\mathcal{I}_y^L(\bullet) = \phi_\mu^L(\mathbf{y}) \frac{(\bullet) \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} \quad \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu, \quad (26)$$

donde ϕ_μ^L se denomina función de colocación:

$$\phi_\mu^L(\mathbf{y}) = \begin{cases} 1 & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L \\ 0 & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu \setminus \Omega_\mu^L \end{cases} \quad (27)$$

El operador \mathcal{I}_y , definido en la Ec. (25), distribuye en forma uniforme el incremento de deformación regular $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R$ en todo el dominio Ω_μ . Observe que es idéntico al utilizado en la parte estable del material (ver Ec. (4) y Ec. (25)).

A diferencia de trabajos previos, para el tratamiento de dominios localizados con geometrías generales se debió modificar la forma del operador de inserción \mathcal{I}_y^L . Ahora en su definición (Ec. (26)) se utilizan dos términos que dependen de la posición \mathbf{y} en el dominio Ω_μ : la normal micro \mathbf{n}_μ y la longitud micro ℓ_μ . Para interpretar estos términos se construye una superficie \mathcal{S}_μ central al dominio localizado Ω_μ^L (Fig. 2). Las normales \mathbf{n}_μ se definen perpendicular a cada punto de la superficie \mathcal{S}_μ , mientras que la longitud ℓ_μ , como el espesor del Ω_μ^L en la dirección de \mathbf{n}_μ . Como caso general se asumen que ambas son variables a lo largo de \mathcal{S}_μ pero constantes en la dirección perpendicular (dirección de \mathbf{n}_μ)⁶. Notar que en la Ec. (26) se destaca la dependencia con las coordenadas \mathbf{y} de ambas variables.

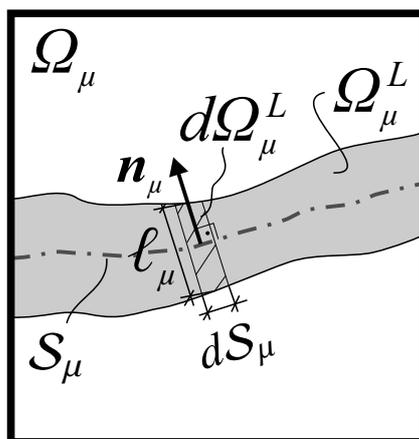


Figura 2: Eje longitudinal \mathcal{S}_μ del dominio localizado Ω_μ^L .

Este operador \mathcal{I}_y^L se utiliza para mapear el incremento del vector salto $\dot{\boldsymbol{\beta}}$ en una magnitud tipo deformación, solamente sobre el dominio localizado Ω_μ^L , debido a la definición del factor ϕ_μ^L . El modo de la deformación insertada ($\frac{\dot{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu}{\ell_\mu}$) es característico del que se produce en una banda con localización de deformaciones.

Teniendo en cuenta las Ecs. (23), (24), (25) y (26), se define en forma explícita la deformación micro:

$$\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R + \phi_\mu^L \frac{\dot{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} + \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (28)$$

⁶Los términos \mathbf{n}_μ y ℓ_μ , aunque se aceptan que están definidos en todo el dominio Ω_μ , pierden significado fuera del dominio localizado Ω_μ^L , allí su valor y variación son arbitrarios mientras que hagan que la Ec. (26) sea integrable.

En vista de la definición cinemática dada en la Ec. (23), y considerando la Ec. (24), las variaciones cinemáticamente admisibles de las deformaciones micro $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ resultan:

$$\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \mathcal{I}_y^*(\mathbf{0}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \mathcal{I}_y^L(\hat{\boldsymbol{\beta}}) + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu = \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \quad (29)$$

donde, como se explicó al principio de la Sec. 3.3, se asume que $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_R = \mathbf{0}$ en la microcelda correspondiente al punto $\mathbf{x} \in \mathcal{S}$.

Al igual que en la etapa estable, se acepta válida la hipótesis de compatibilidad de deformaciones en el campo de deformaciones fluctuantes $\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ (Ec. (7)).

3.3.2. Admisibilidad Cinemática

Según lo discutido en la Sec. 3.3.1, \mathcal{I}_y^* realiza una distribución de la cinemática macro en dos dominios diferentes, en Ω_μ y en Ω_μ^L , es decir existen dos procedimientos independientes de inserción. Esto sugiere que se deben imponer dos restricciones de admisibilidad cinemática independientes, dadas por las ecuaciones siguientes⁷:

$$\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y^*(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R, \dot{\boldsymbol{\beta}}) d\Omega = \int_{\Omega_\mu} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (30)$$

$$\int_{\Omega_\mu^L} \mathcal{I}_y^*(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R, \dot{\boldsymbol{\beta}}) d\Omega = \int_{\Omega_\mu^L} \dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (31)$$

Reemplazando en las Ecs. (30) y (31) la definición del incremento de la deformación micro $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ (Ec. (23)) se deducen las condiciones que deben cumplir las deformaciones fluctuantes para satisfacer las hipótesis de admisibilidad cinemática:

$$\int_{\Omega_\mu} \dot{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu d\Omega = \int_{\Omega_\mu} \nabla_y \otimes^s \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu d\Omega = \mathbf{0} \quad (32)$$

$$\int_{\Omega_\mu^L} \dot{\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu d\Omega = \int_{\Omega_\mu^L} \nabla_y \otimes^s \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu d\Omega = \mathbf{0} \quad (33)$$

Para escribir el problema mecánico en la microescala en términos del campo de desplazamiento fluctuante $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$, se aplica el teorema de Stokes Generalizado² a las Ecs. (32) y (33), obteniendo:

$$\int_{\Gamma_\mu} \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \quad (34)$$

$$\int_{\Gamma_\mu^L} \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \quad (35)$$

A diferencia del modelo multiescala clásico, el modelo propuesto para la etapa de inestabilidad material tiene una restricción adicional, no estándar, caracterizada por la Ec. (35), la

⁷Las Ecs. (30) y (31) se pueden interpretar, si se multiplica ambos lados por $\frac{1}{|\Omega_\mu|}$ y $\frac{1}{|\Omega_\mu^L|}$ respectivamente, como una equivalencia entre la media de la deformación insertada $\mathcal{I}_y^*(\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_R, \dot{\boldsymbol{\beta}})$ y la media de la deformación en la microescala $\dot{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$.

cual junto a la Ec. (34), definen el espacio solución (\mathcal{U}_μ^L) y el de variaciones cinemáticamente admisibles (\mathcal{V}_μ^L), para el campo de los desplazamientos fluctuantes micros en la etapa inestable:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}_\mu^L(\Omega_\mu) &= \left\{ \dot{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \mid \dot{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \dot{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} \dot{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \\ \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) &= \left\{ \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \mid \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathbf{H}^1(\Omega_\mu) \wedge \int_{\Gamma_\mu} \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu d\Gamma = \mathbf{0} \wedge \int_{\Gamma_\mu^L} \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \otimes^s \mathbf{v}_\mu^L d\Gamma = \mathbf{0} \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

En la definición de los espacios \mathcal{U}_μ^L y \mathcal{V}_μ^L en la Ec. (36) se asume implícitamente incorporadas las restricciones mínimas para evitar el movimiento como cuerpo rígido de la microcelda³. Observe que se pueden seleccionar subespacios más restringidos (Taylor, Lineal, Periódico, etc.), tanto sobre la restricción de la Ec. (34) (condiciones de borde sobre Ω_μ) como la de la Ec. (35) (condiciones de borde sobre Ω_μ^L).

A partir de Ec. (36) es posible definir el espacio de variaciones admisibles de las deformaciones fluctuantes (\mathcal{D}_μ^L):

$$\mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu) = \left\{ \hat{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu \mid \hat{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}}_\mu = \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \wedge \hat{\hat{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) \right\} \quad (37)$$

3.3.3. Admisibilidad Energética

Se parte del mismo Principio de Hill-Mandel Generalizado utilizado para la parte estable (Ec. (13)), midiendo la potencia interna con respecto al operador de inserción propuesto \mathcal{I}_y^L (Ec. (24)). La Ec. (38) asegura una equivalencia energética media entre la potencia generada por el operador de inserción y la producida en la microescala⁸:

$$\begin{aligned} \sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \mathcal{I}_y^L(\hat{\boldsymbol{\beta}}) d\Omega \right) &= \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \\ \forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathcal{F}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \text{ cinemáticamente admisible} \end{aligned} \quad (38)$$

donde $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ está definido por la Ec. (29). El término $\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t$ tiene el mismo significado dado en la Sec. 3.2.3. Con el símbolo \mathcal{F} se indica el espacio de los todos los vectores.

Si en la Ec. (38) se desarrolla el operador \mathcal{I}_y^L considerando la Ec. (26) y se reemplaza $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ por la Ec. (29), se obtiene:

$$\begin{aligned} \sigma : \left(\int_{\Omega_\mu} \phi_\mu^L \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right) &= \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \left(\phi_\mu^L \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} + \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \right) d\Omega \\ \forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathcal{F}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (39)$$

Además teniendo en cuenta la definición de la función de colocación ϕ_μ^L , dada por la Ec. (27), se llega a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \sigma : \left(\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right) &= \int_{\Omega_\mu^L} \sigma_\mu : \frac{\hat{\boldsymbol{\beta}} \otimes^s \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega + \int_{\Omega_\mu} \sigma_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \\ \forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathcal{F}, \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu) \end{aligned} \quad (40)$$

⁸El Principio de Hill-Mandel se puede interpretar como una equivalencia de medias, como se indica en el pie de página ⁴ de la página 7.

Al considerar la independencia con las coordenadas \mathbf{y} del salto virtual macro $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ se puede escribir⁹:

$$\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \overbrace{\left(\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right)}^A \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} = \left(\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\boldsymbol{\sigma}_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} + \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (41)$$

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

Para interpretar el factor A de la Ec. (41), con suficiente aproximación para la mayoría de los casos, se puede expresar el diferencial de área de Ω_μ^L como: $d\Omega_\mu^L = \ell_\mu(\mathbf{y}) dS_\mu$ (en la Fig. 2 se indican las variables usadas para un caso 2D de espesor unitario). Haciendo un cambio de dominio de integración (al ser constante ℓ_μ en dirección de \mathbf{n}_μ , ver Sec. 3.3.1) el factor A queda:

$$\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega = \int_{S_\mu} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} \ell_\mu(\mathbf{y}) dS = \int_{S_\mu} \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) dS \quad (42)$$

a partir del cual es posible definir la siguiente relación:

$$\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega = \bar{\mathbf{n}}_\mu |S_\mu| \quad (43)$$

donde la $\bar{\mathbf{n}}_\mu$ tiene la interpretación de una media de las \mathbf{n}_μ sobre la superficie S_μ :

$$\bar{\mathbf{n}}_\mu = \frac{1}{|S_\mu|} \int_{S_\mu} \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y}) dS \quad (44)$$

Reemplazando la Ec. (43) en el término de la izquierda de la Ec. (41) se obtiene:

$$\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right) \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{n}}_\mu) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} |S_\mu| \quad (45)$$

La Ec. (45) muestra que el dominio efectivo donde se produce trabajo virtual macro es S_μ , quedando en evidencia cual es la magnitud que ejerce potencia virtual sobre las variaciones admisibles de la variable cinemática macro $\hat{\boldsymbol{\beta}}$.

Recuerde que esta microcelda está vinculada con un punto \mathbf{x} en la macroescala sobre una fisura \mathcal{S} donde la potencia producida sobre la misma se mide como $\mathbf{T} \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}}$. Los términos duales de generación de potencia son la tracción \mathbf{T} y el $\boldsymbol{\beta}$ (Secs. 2 y 3.1), ambos sobre la fisura \mathcal{S} .

Comparando esa dualidad con el resultado de la Ec. (45) se deduce que el término $\boldsymbol{\sigma} \cdot \bar{\mathbf{n}}_\mu$ corresponde a la tracción macroscópica \mathbf{T} . De esta forma, es posible escribir:

$$\mathbf{T} \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} |S_\mu| = \left(\int_{\Omega_\mu^L} \frac{\boldsymbol{\sigma}_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \right) \cdot \hat{\boldsymbol{\beta}} + \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega \quad (46)$$

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

La Ec. (46) es una ecuación variacional que se debe cumplir $\forall \hat{\boldsymbol{\beta}} \in \mathcal{F}$ y $\forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu)$. Por conveniencia se asume primero que las variaciones admisibles $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ son nulas y que las variaciones admisibles $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ se mantienen arbitrarias, obteniéndose la fórmula de homogeneización de la tracción sobre la fisura \mathcal{S} :

$$\mathbf{T} = \frac{1}{|S_\mu|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{\boldsymbol{\sigma}_\mu \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \quad (47)$$

⁹Se aplicó la igualdad tensorial $\mathbf{A} : (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) = \mathbf{a} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{a}$, donde \mathbf{A} es un tensor simétrico de segundo orden.

Seguindo argumentos similares a los discutidos en la Sec. 3.2.3 y asumiendo continuidad de tracciones en t_N (para más detalles ver Sánchez et al., 2011b), es posible obtener la fórmula de homogeneización de la tracción en forma incremental:

$$\dot{\mathbf{T}} = \frac{1}{|\mathcal{S}_\mu|} \int_{\Omega_\mu^L} \frac{\dot{\boldsymbol{\sigma}}_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) \cdot \mathbf{n}_\mu(\mathbf{y})}{\ell_\mu(\mathbf{y})} d\Omega \quad (48)$$

donde $\dot{\boldsymbol{\sigma}}_\mu$ se determina con la Ec. (20) y las tracciones se actualizan de la siguiente forma:

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^{t-dt} + \dot{\mathbf{T}} dt \quad (49)$$

En segunda instancia se considera en la Ec. (46) que las variaciones admisibles $\hat{\boldsymbol{\beta}}$ son nulas, mientras que $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu$ es arbitraria a menos de la restricción de pertenecer a \mathcal{D}_μ^L :

$$\int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu : \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_\mu \in \mathcal{D}_\mu^L(\Omega_\mu) \quad (50)$$

obteniendo de esta forma la versión variacional del problema de equilibrio en la microescala, el cual puede expresarse, haciendo uso de Ec. (7), en función de los desplazamientos fluctuantes $\tilde{\mathbf{u}}_\mu$ como:

Hallar $\dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathcal{W}_\mu^L(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\int_{\Omega_\mu} \dot{\boldsymbol{\sigma}}_\mu(\{\boldsymbol{\varepsilon}_\mu\}^t) : \nabla_{\mathbf{y}} \otimes^s \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu d\Omega = 0 \quad \forall \dot{\tilde{\mathbf{u}}}_\mu \in \mathcal{V}_\mu^L(\Omega_\mu) \quad (51)$$

Notar que el problema que se resuelve es análogo al que se dedujo para las microceldas asociadas a los puntos $\mathbf{x} \in \Omega_\mu \setminus \mathcal{S}$. La única diferencia viene dada por el espacio de variaciones cinemáticamente admisibles al que está suscrito (que se refleja en condiciones de borde diferentes en el problema mecánico).

El proceso de resolución de la formulación propuesta permite partir de la microcelda original definida para el régimen estable del punto \mathbf{x} y, en forma natural, derivar en la microcelda utilizada para la parte inestable del mismo punto.

4. EJEMPLO NUMÉRICO

En las secciones previas se extendió la formulación de un modelo multiescala previamente propuesto por los autores para el tratamiento de falla de materiales abarcando problemas donde el dominio localizado Ω_μ^L adquiere forma arbitraria, y por lo tanto las normales a la banda de falla \mathbf{n}_μ y el espesor de la misma ℓ_μ varían a lo largo del dominio localizado.

En esta sección se presenta un ejemplo numérico simple donde se aplica esta generalización en la formulación para mostrar la potencialidad del método propuesto y consistencia en los resultados.

4.1. Descripción

En la Fig. 3-a se esquematiza el problema mecánico que se resuelve en la macroescala. 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 utiliza la hipótesis de deformación plana en ambas escalas.

A nivel micro, para promover que el dominio Ω_μ^L resulte tortuoso, se diseñaron dos microceldas cuadradas formadas por poros elípticos dispuestos en ubicación y dirección aleatoria

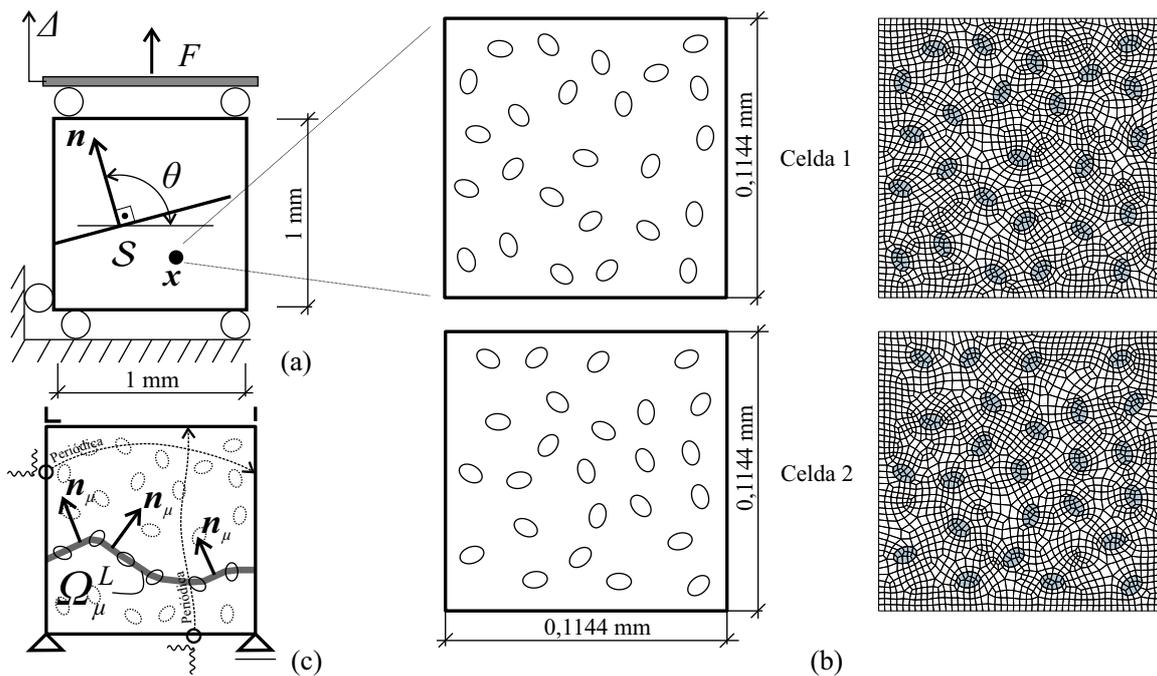


Figura 3: Barra uniaxial. (a) Detalle del elemento estructural y variables usadas en la macroscala, junto con la fisura macro S . (b) Microceldas con poros elípticos aleatorios utilizadas en la microescala y sus correspondientes mallas de elementos finitos. (c) Diagrama de las normales n_μ , dominio localizado Ω_μ^L y esquema de condiciones de borde aplicadas en la microescala.

(estadísticamente uniforme), rodeada por una matriz homogénea. Se distribuyeron 25 elipses¹⁰ iguales con un eje mayor igual a 0,01 mm y una relación de ejes igual a 1,5. Las dimensiones de la microcelda se definieron de tal forma de obtener una porosidad de $f_v = |\Omega_\mu^{\text{vacíos}}|/|\Omega_\mu| = 0,1$.

Las condiciones de borde que se aplicaron a la microcelda fueron las del submodelo Periódico Clásico sobre la frontera Γ_μ , y así cumplir la restricción correspondiente a las Ecs. (10) y (34), tanto en la etapa estable como inestable (Fig. 3-c). En la etapa inestable ($t > t_N$) se incorporaron las condiciones borde sobre el dominio localizado Ω_μ^L , donde se eligió un submodelo de Taylor (el cual prescribe $\hat{\mathbf{u}}_\mu = \mathbf{0} \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^L$), cumpliendo con la restricción de la Ec. (35).

El material de la matriz en la microescala está caracterizado por un modelo constitutivo fenomenológico de daño sólo tracción, con un módulo de elasticidad de 200000 MPa, un coeficiente de Poisson de 0,2, una tensión última de 2,4 MPa y una energía de fractura de 0,5 Nm/m². Los poros, por conveniencia en la determinación del dominio localizado y la imposición de las condiciones de borde no estándar sobre Ω_μ^L (Sec. 3.3.2), se modelaron como un material elástico con un módulo de elasticidad muy pequeño (2×10^{-6} MPa).

Cada punto \mathbf{x} de la macroscala está vinculado a una microcelda con las características explicadas previamente. En este ejemplo se resuelven dos problemas, ambos con la misma macroestructura pero utilizando en cada uno de ellos microceldas con distribución de elipses diferentes. En la Fig. 3-b se indicó la distribución, junto con sus dimensiones, para las dos microceldas adoptadas: Celda 1 y Celda 2.

En Toro et al. (2013b) se presentó la teoría y algoritmos computacionales necesarios para la implementación numérica mediante elementos finitos (FE²) del modelo multiscale propuesto. Para la resolución numérica del presente ejemplo se utiliza en la macroscala elementos finitos

¹⁰El criterio para definir la cantidad de elipses fue el necesario para obtener un tensor constitutivo tangente homogeneizado suficientemente isotrópico en la etapa elástica.

triangulares lineales del tipo E-FEM (Oliver y Huespe, 2004), que permiten la captura de las discontinuidades fuertes.

En la microescala se adopta un esquema de fisura difusa (smeared crack, Rots et al. (1985); Oliver et al. (1990) y cuadrángulos estándares bilineales, donde en la discretización de la Celda 1 se usaron 2142 elementos y en la Celda 2, 2122 elementos. Las mallas se indican en la Fig. 3-b.

Para la determinación del dominio localizado, Ω_μ^L , se sigue el procedimiento descrito en Sánchez et al. (2011b, 2013). Para la definición de las normales micro \mathbf{n}_μ y las longitudes ℓ_μ se determina una curva S_μ central a la superficie Ω_μ^L (Fig. 2). El sentido de la normal macro, \mathbf{n} , se utiliza para una correcta definición de las normales micro (Fig. 3-c).

4.2. Resultados

En la Fig. 4 se muestran las respuestas de las macroestructuras asociadas a la Celda 1 y a la Celda 2. En ella se grafica en abscisas el desplazamiento vertical Δ impuesto y en las ordenadas la fuerza resultante vertical F de la cara superior de la barra (Fig. 3-a).

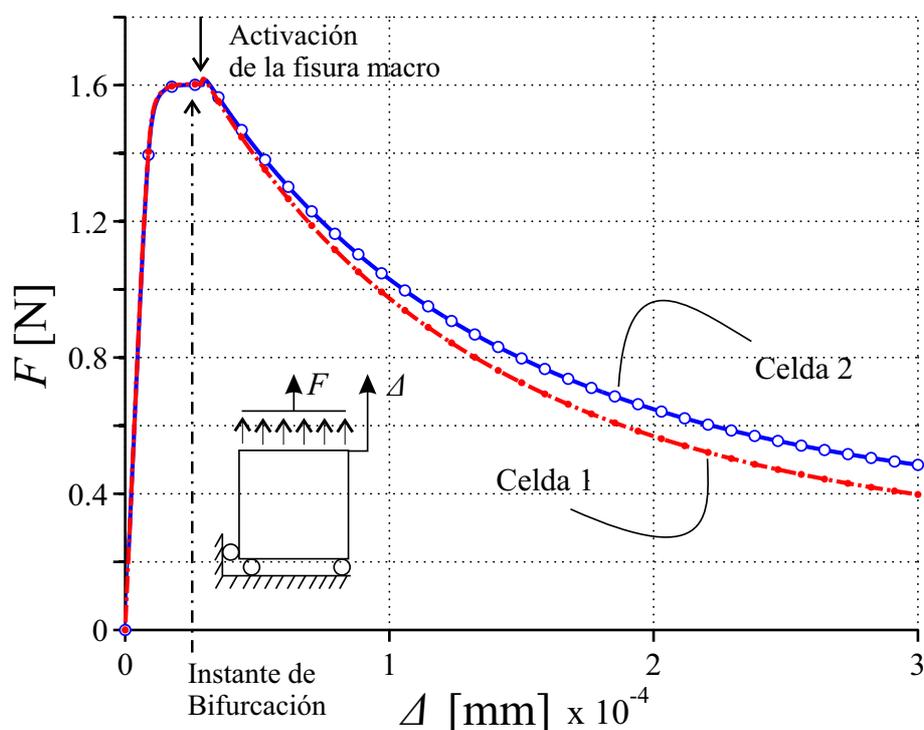


Figura 4: Gráfica de la fuerza total vertical F vs el desplazamiento vertical Δ del extremo superior de la barra utilizando las Celdas 1 y 2.

Debido a que la macroescala es homogénea y hasta la bifurcación posee una distribución uniforme de esfuerzos, todos los puntos materiales macroscópicos bifurcan simultáneamente. Por ello, en la Fig. 4, se marcó el instante de bifurcación junto con el de activación de la fisura cohesiva macro. Este último también corresponde al de activación del modelo cohesivo multiscala (Sec. 3.3).

En la macroescala se detecta inestabilidad material (bifurcación) cuando el desplazamiento Δ alcanza los $0,248 \times 10^{-4}$ mm en el problema de la Celda 1 y los $0,254 \times 10^{-4}$ mm en el de la Celda 2. Para que el dominio localizado se forme correctamente se permite que transcurran algunos pocos pasos de tiempo antes de activar la discontinuidad fuerte. En la Celda 1 se activa

cuando se alcanza $\Delta = 0,288 \times 10^{-4}$ mm y, para la Celda 2, cuando $\Delta = 0,294 \times 10^{-4}$ mm. Como se aprecia en estos valores y en la Fig. 4, este período es muy reducido y no tiene influencia alguna en la respuesta global.

A partir del análisis de bifurcación se determina el ángulo θ de la normal \mathbf{n} a la fisura \mathcal{S} en la macroescala (Fig. 3-a). Para la Celda 1 es $\theta = 95,4^\circ$ y para la Celda 2 es $\theta = 89,55^\circ$.

Se observa que los resultados obtenidos para ambas celdas son bastante similares, tanto en la gráfica de respuesta (Fig. 4) como en los tiempos de bifurcación e inclinación de la normal \mathbf{n} . En la etapa estable (previo a la bifurcación) las respuestas se corresponden casi exactamente, pero en la etapa inestable se observa una pequeña diferencia. Considerando la arbitrariedad de la microcelda, de la malla y las disimilitudes en el dominio de falla resultante (Fig. 6), se argumenta que este resultado muestra suficiente consistencia y prueba la capacidad de modelado de la generalización propuesta. Considere además que la diferencia puede estar influida por 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 dominio localizado en la Fig. 6 cuando la banda de falla atraviesa elementos finitos mal direccionados respecto a ésta.

En la Fig. 5 se muestra la distribución del daño para distintos instantes, sobre la microcelda correspondiente al problema de la Celda 1. En la Fig. 6 se indican distintas etapas de la evolución del criterio para la determinación del dominio localizado Ω_μ^L , tanto para la Celda 1 como la Celda 2. En ambas figuras, se asocia el mapa de daño/dominio localizado con puntos sobre la gráfica de respuesta $F-\Delta$: Ⓐ (en $\Delta = 0,1 \times 10^{-4}$ mm), Ⓑ ($0,196 \times 10^{-4}$ mm), Ⓒ ($0,288 \times 10^{-4}$ mm; aproximadamente en el momento en que se activó la macrofisura) y Ⓓ ($2,936 \times 10^{-4}$ mm).

Un aspecto interesante observado en las Figs. 5 y 6 es que durante la etapa estable del material homogeneizado evolucionan varias “microfisuras” (zonas dispersas con degradación y crecimiento del daño), y que eventualmente por efecto de la degradación y localización coalescen en una sola fisura con camino tortuoso. El instante de coalescencia micro en una única banda de falla está directamente asociado al instante de bifurcación macroscópica.

El dominio localizado Ω_μ^L se determina al momento de activar al discontinuidad fuerte en función del estado del criterio de bifurcación, y, por hipótesis, se mantiene fijo de allí en adelante. La gráficas correspondientes a los puntos Ⓒ y Ⓓ de las Celdas 1 y 2 de la Fig. 6 indican, justamente, como queda definido el Ω_μ^L para cada problema.

5. CONCLUSIONES

En este trabajo se desarrolló una generalización de la formulación multiescala presentada en Sánchez et al. (2011b, 2013). La misma resuelve el problema de falla de materiales en un contexto multiescala manteniendo el concepto de RVE ya que es posible encontrar, en la etapa inestable del material, un tamaño de microcelda donde la respuesta homogeneizada resulta objetiva.

Esta generalización consiste asumir que el dominio localizado adquiere una geometría arbitraria, la cual puede parametrizarse en términos de la normal a la línea media de la zona de falla (\mathbf{n}_μ) y el espesor de localización (ℓ_μ), ambas variables con la posición en la microcelda. La misma permite resolver adecuadamente problemas donde el dominio Ω_μ^L resulte tortuoso tanto por la distribución geométrica de las heterogeneidades de la microcelda o inducidas por la disposición de los elementos finitos en la malla. Observar que con ella se recupera lo propuesto en los trabajos previos, si la longitud ℓ_μ y la normal \mathbf{n}_μ resultan constantes a lo largo de Ω_μ^L , y esta última similar a la normal de bifurcación \mathbf{n} .

Esta extensión de la formulación se dedujo a partir de los mismos conceptos fundamentales

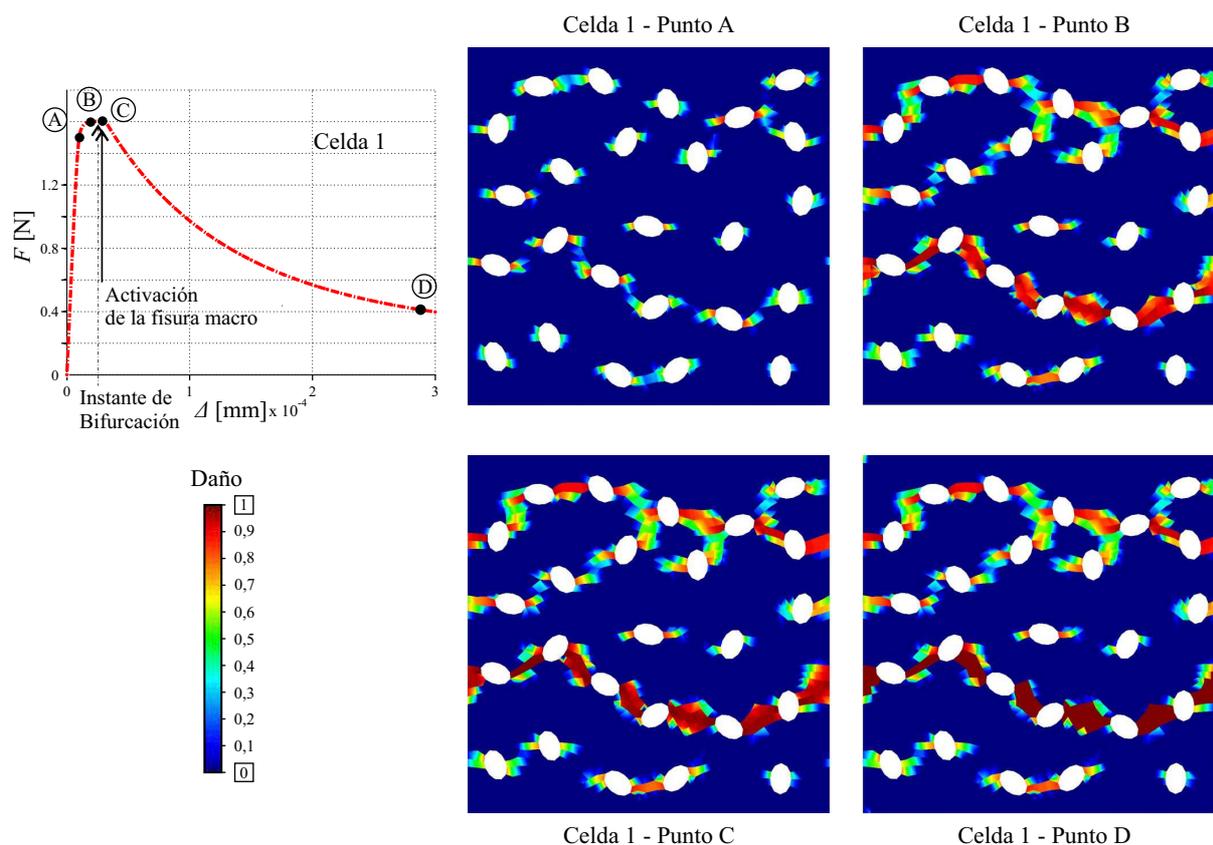


Figura 5: Evolución del daño en la Celda 1.

inherentes al modelado multiescala y usados previamente, como son la definición de la Cinemática Micro, la aplicación de la Admisibilidad Cinemática y Energética.

Por último, a través de un ejemplo simple con dominio localizado tortuoso, se mostró consistencia en los resultados cuando se aplica la generalización presentada.

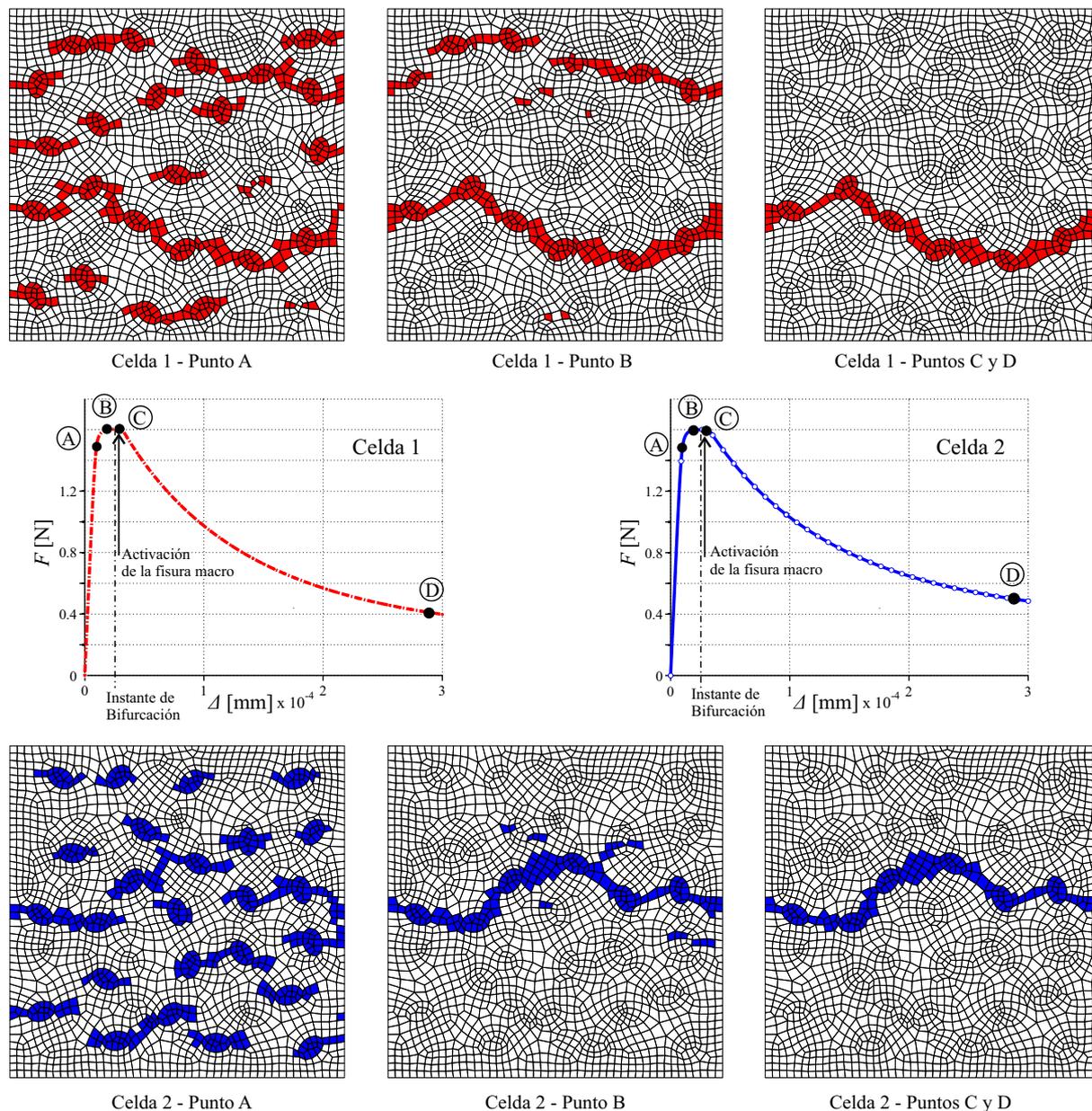


Figura 6: Evolución del criterio de determinación del dominio localizado Ω_{μ}^L en las Celdas 1 y 2.

REFERENCIAS

- 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.
- Gitman I., Askes H., y Sluys L. Representative volume: Existence and size determination. *Engineering Fracture Mechanics*, 74:2518–2534, 2007.
- 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>.
- Miehe C. y Koch A. Computational micro-to-macro transition of discretized microstructures undergoing small strain. *Arch. Appl. Mech.*, 72:300–317, 2002.
- 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. y Huespe A. Theoretical and computational issues in modelling material failure in strong discontinuity scenarios. *Comput. Meth. App. Mech. Eng.*, 193:2987–3014, 2004.
- 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.
- Rots J., P. N., Kusters G.M.A., y Blaauwendraad T. Smeared crack approach and fracture localization in concrete. *HERON.*, 1, 1985.
- Rudnicki J. y Rice J. Condition for the localization of deformations in pressure sensitive dilatant materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 23:371–394, 1975.
- 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., 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., Blanco P.J., Huespe A.E., y Feijóo R.A. Failure-oriented multi-scale variational formulation for softening materials. *LNCC Internal Report*, 2011b.
- 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.
- 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 1887–1877. 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., 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, 2012. Abstract.

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.*, 2013b. En prensa.