

Cálculo de Microestructuras Mediante Relajación de Problemas Variacionales No Convexos

René J. Meziat, Jorge Villalobos y Diego A. Patiño

Grupo de Investigación en Optimización y Análisis Numérico

Departamento de Matemáticas
Universidad de los Andes

Proyecto de Investigación 1596
Fundación para la Promoción de la Investigación y la Tecnología
Bogotá, Mayo del 2004

Índice general

Introducción	v
1. Análisis Convexo	1
2. Fundamentos Físicos	9
2.1. Descripción Básica de Materiales	10
2.1.1. Electrones y Átomos	10
2.1.2. Enlaces atómicos	14
2.1.3. Cristales	17
2.1.4. Direcciones cristalográficas y planos	21
2.1.5. Empaquetamiento en cristales	24
2.1.6. Imperfecciones cristalinas	28
2.2. Aleaciones hierro-carbono (Fe-C)	31
2.2.1. Aleaciones de hierro	33
2.2.2. Transformación Martensítica	34
2.3. Propiedades Mecánicas de los Metales	35
2.3.1. Aspectos del Flujo Plástico Continuo, Encuellamiento	38
2.4. Teoría de la elasticidad	40
2.4.1. Cálculo variacional	40
2.4.2. Problemas Variacionales No Convexos en Elasticidad	42
3. Problemas Variacionales en 1D	45
3.1. Problemas variacionales y elasticidad	46
3.1.1. Ajuste de datos de una curva esfuerzo-deformación	47
3.2. Teoría de relajación y medidas parametrizadas	50
3.2.1. Relajaciones semidefinidas	53
3.2.2. Cálculo de envolventes convexas	56
3.2.3. Comportamiento de las Sucesiones Minimizantes	60
3.2.4. Ejemplo de Bolza	61
4. Cálculo de Microestructura en 1D	66
4.1. Envolvente convexa	67
4.2. Solución del problema	68

5. Análisis de Envolturas Convexas en 2D	72
5.1. Caracterización del problema	73
5.2. Implementación del problema	74
5.3. Construcción de la medida	79
6. Problemas Variacionales en 2D	89
6.1. Método de momentos para superficies	90
6.2. Envolturas convexas bidimensionales	91
6.3. Aplicación	92
6.4. Resultados	95
7. Cálculo de una Microestructura en 2D	101
8. Policonvexidad en Elasticidad	107
8.1. Estimación de envolturas policonvexas	110
8.1.1. Ejemplos	115
9. Herramientas Computacionales: AMPL	119
9.1. Instalación	121
9.2. Solucionadores	122
9.3. Elementos de Modelaje	123
9.3.1. Carga y solución de modelos y datos	124
9.4. Herramientas y Comandos	126
9.4.1. Comandos de modelaje	127
9.4.2. Expresiones matemáticas y lógicas	129
9.4.3. Formato de datos	130
9.5. Ejemplos	132
9.5.1. Problema de Transporte	132
9.5.2. Problema de Bolza y Medidas de Young	135
9.5.3. Cálculo de Microestructuras	136
10. Herramientas Computacionales: GAMS	138
10.1. Ejemplos	139
10.2. Problema de Bolza	142
11. Programación Semidefinida	148
11.1. Envolturas Convexas y Optimización Global	148
11.2. Elementos de teoría y práctica	151
11.3. Métodos computacionales	152
11.3.1. Algunos problemas interesantes en desigualdades matriciales	153
11.4. Aspectos computacionales	154
11.4.1. Terminología	155
11.4.2. Secuencia de comandos	156
11.4.3. Editor gráfico LMI	160
11.5. Rutinas de programas semidefinidos	160
11.5.1. Envolturas convexas	163

12. Conclusiones	165
Agradecimientos	173

Introducción

Esta investigación es un trabajo de naturaleza interdisciplinaria que pretende dar los fundamentos teóricos y las herramientas computacionales para resolver principios variacionales no convexos que aparecen como modelos energéticos en elasticidad no lineal. El punto de partida son funcionales que representan el balance energético, en cuerpos sometidos a diferentes condiciones de esfuerzo, los cuales pueden expresarse como

$$I(u) = \iint_{\Omega} \left\{ \phi(x, y; \vec{\nabla} u) + \psi(x, y; u) \right\} dx dy \quad (1)$$

donde ϕ es un potencial de energía de deformación, comúnmente dado por la naturaleza atómica de la red cristalina que conforma el material del cuerpo en cuestión. Por esta razón ϕ admite una dependencia en las variables x e y de una geometría bidimensional. Asimismo, la función ψ representa el potencial de energía correspondiente a fuerzas, cargas y acciones externas sobre el cuerpo. La teoría de elasticidad sugiere que el estado de deformación en el cuerpo estará descrito por la función

$$u: \Omega \rightarrow R^3$$

que logre hacer mínimo el valor del balance energético en (1). Si existen restricciones geométricas sobre el campo de desplazamientos u , éstas pueden ser impuestas en la forma de condiciones de contorno:

$$u = g \quad \text{en} \quad \partial\Omega. \quad (2)$$

De esta manera el modelo matemático que permite representar el estado de deformación de un cuerpo, bajo condiciones de carga particulares y restricciones geométricas sobre el campo de deformaciones, es el problema de cálculo de variaciones que consiste en encontrar la función admisible u que pueda minimizar el funcional I dado por la integral en (1) y que a la vez cumpla con las condiciones de frontera impuestas en (2).

Los problemas de cálculo de variaciones han estimulado el desarrollo de ideas y conceptos matemáticos de gran importancia en análisis funcional. El tipo de problemas variacionales que nos interesa abordar en este estudio tienen algunas características que los hacen particularmente difíciles de entender empleando los métodos usuales como son las ecuaciones de Euler-Lagrange o los métodos

directos del cálculo de variaciones [1, 2]. La característica más importante que explica la dificultad en el análisis de este tipo de problemas, es el hecho que no podemos justificar de ninguna manera la convexidad en el potencial de energía de deformación ϕ , como función del gradiente de la deformación $\vec{\nabla} u$. Esta situación se deduce de la siguiente observación de naturaleza física: cuando nos interesamos por materiales hechos de aleaciones cristalinas cuya red atómica admite varias configuraciones estables posibles, entonces no podemos suponer que el potencial ϕ tiene una geometría convexa, debido a que si ese fuera el caso, entonces no habría lugar a más de un estado energético estable dentro de las posibles configuraciones atómicas de la red cristalina del material. Basta con observar que una superficie convexa no admite más que un sólo valor mínimo.

Desde el punto de vista del análisis matemático, de los principios variacionales que comentamos aquí, surgen dificultades bastante delicadas. En primer lugar, resaltamos el hecho que el problema variacional planteado con la ecuación (1) es de naturaleza vectorial, en el sentido que la función admisible u es un campo de desplazamientos y su gradiente $\vec{\nabla} u$ es una matriz de deformaciones. Este tipo de problemas variacionales tienen características cualitativamente diferentes a los problemas planteados en funciones escalares [3]. Por otra parte, la naturaleza no convexa del potencial de energía de deformación ϕ impide aplicar en este problema los métodos analíticos del cálculo de variaciones, en especial el método directo, para determinar la existencia de minimizadores. Por lo tanto no podemos asegurar a priori la existencia de minimizadores para este tipo de problemas [1, 3, 4].

De hecho hay que enfrentar la posibilidad de que el problema variacional en cuestión carezca de solución, pero a pesar de ello hay que persistir en el modelo, dado que representa situaciones físicas de mucho interés en ingeniería y ciencia de los materiales. Ilustraremos esta situación con un ejemplo particular unidimensional, llamado ejemplo de Bolza, que nos servirá como caso de estudio en varias ocasiones.

El ejemplo de Bolza está descrito como el siguiente problema variacional no convexo:

$$\min_u I(u) = \int_0^1 \left\{ \left(1 - u'(x)^3 \right)^2 + u(x)^3 \right\} dx \quad (3)$$

donde la función u está restringida a condiciones de frontera nulas: $u(0) = u(1) = 0$. Si tomamos espacios de funciones que incluyan a las funciones lineales a trozos, pero continuas, como puede ser el espacio de Sobolev $H_0^{1,4}(0,1)$, entonces es fácil mostrar que la integral I en (3) carece de minimizador. Basta con observar que cero es cota inferior para I , lo cual se deduce de la positividad de los términos en la integral, pero a la vez podemos construir *sucesiones minimizantes* $\{u_n\}$ tales que $I(u_n) \rightarrow 0$. Así confirmamos que 0 es un ínfimo para los valores de I sobre una familia de funciones admisibles. Pero también es fácil darse cuenta que no hay ninguna función admisible para la cual $I(u) = 0$. La razón está en que este hecho obligaría a admitir que existe una función cuyas derivadas toman los valores ± 1 en todo el intervalo $[0,1]$, pero a la vez la función debería tomar el valor cero en esta región, lo cual no es de ninguna manera

posible. Concluimos que I no tiene minimizadores.

Detengámonos por un momento en la obtención de una sucesión minimizante $\{u_n\}$ para el ejemplo anterior. Si lográramos dividir el intervalo $[0, 1]$ en $2n$ subintervalos de igual tamaño, podríamos construir una poligonal (spline-1) que parta del punto $(0, 0)$ y finalice en el punto $(1, 0)$ como lo exigen las condiciones de frontera, siempre que cuidáramos de tomar como pendiente en cada subintervalo uno de los valores entre 1 y -1 repartidos en proporciones iguales respecto al número de subintervalos: n de ellos tendrían pendiente 1 y los n restantes, pendiente -1 . Si las pendientes 1 y -1 se toman de manera alternada, esta construcción tendría un menor valor para la integral I mostrada en (3). Esto daría lugar a una sucesión minimizante $\{u_n\}$ donde u_n es la función lineal a trozos correspondiente a la construcción que acabamos de describir.

En términos generales, para que una sucesión de funciones admisibles $\{u_n\}$ pueda ser una sucesión minimizante para la integral I , debemos hacer que las derivadas de sus términos: $u'_n(x)$ se aproximen a los valores ± 1 que son los valores mínimos en el potencial no convexo:

$$\phi(t) = (1 - t^2)^3$$

pero a la vez debemos hacer que el valor neto de u_n sea cada vez más pequeño. Aunque esto se puede lograr de muchas maneras, todas las formas de conseguirlo reproducen un comportamiento común: muestran una oscilación persistente en escalas de tamaño cada vez más pequeñas y además tales oscilaciones tienen lugar entre pendientes muy cercanas a los valores ± 1 . Vemos entonces que el problema variacional del ejemplo de Bolza, aunque carece de solución (no posee minimizadores), impone un comportamiento oscilatorio muy particular para sus sucesiones minimizantes.

Es importante resaltar que este comportamiento oscilatorio es de gran importancia para la adecuada comprensión del sistema físico que representa el problema variacional. Es precisamente esta forma de oscilación o alternancia, la que aclarará diferentes propiedades en el comportamiento de cuerpos formados por materiales con potenciales de deformación no convexos, como ocurre en aleaciones con varias estructuras cristalinas estables. Por ejemplo, si el potencial ϕ representa dos estados estables diferentes en sus valores mínimos, entonces esperamos que una alternancia entre esos valores haga cada vez más pequeño el valor de la integral I en (3). Por lo cual es natural que el sistema físico intente tomar estos dos estados en proporciones iguales y se distribuyan de manera pareja sobre el cuerpo en cuestión. Si aplicamos esta observación al caso de una red cristalina, en la cual los estados energéticos estables corresponden a dos configuraciones atómicas diferentes de la red, la distribución o repartición de estas dos posibles configuraciones cristalinas a lo largo de todo el cuerpo dará lugar a una *microestructura*. Abordaremos esta situación desde el punto de vista físico en el capítulo 2.

El ejemplo de Bolza es un modelo variacional apropiado para la teoría de barras elásticas, por lo tanto la ausencia de convexidad en el potencial de energía de deformación implica la ausencia de minimizadores, que a la vez está ligada

con la presencia de oscilaciones persistentes en las sucesiones minimizantes del problema. Por último, la alternancia entre los valores ± 1 para las derivadas de los términos de sus sucesiones minimizantes, implica la coexistencia o mezcla de dos tipos diferentes de fases sólidas en el material de la barra, para conseguir un balance de energía menor a lo largo de todo el material. Esta situación se reproduce en el fenómeno físico conocido como endurecimiento por deformación, el cual surge cuando probetas de ciertas aleaciones comerciales se someten a cargas de tensión más allá de su rango elástico. Vemos así que la microestructura desarrollada en el cuerpo tiene implicaciones en su comportamiento macroscópico. Esto motiva el desarrollo y estudio de modelos matemáticos que permitan representar adecuadamente las microestructuras subyacentes a principios variacionales no convexos en elasticidad no lineal. Este tema lo trataremos con detalle en los capítulos 4 y 7.

Este planteamiento tiene complicaciones graduales de naturaleza cualitativa. En primer lugar debemos proponer métodos y técnicas de análisis para problemas variacionales no convexos en una dimensión, cuando el potencial ϕ tiene una forma más general que la forma particular que adquiere en el ejemplo de Bolza. Esto lo hemos conseguido para los casos en que el funcional ϕ toma una forma polinomial como:

$$\phi(t) = \sum_{i=0}^{3n} c_i(x, u) t^i$$

y la función potencial ψ tiene una forma arbitraria. Desarrollaremos estos métodos detalladamente en el capítulo 3.

Más allá de los casos unidimensionales debemos enfrentarnos a problemas escalares en dos dimensiones. Los llamamos escalares porque la función de deformación $u: \Omega \rightarrow R$ está definida en un dominio bidimensional $\Omega \subset R^2$, pero toma valores escalares, es decir que u es un campo escalar. En estos casos el gradiente de u es un vector en dos variables: $\nabla u = (u_x, u_y)$. De manera que la función potencial

$$\phi = \phi(x, y; u_x, u_y)$$

depende de las derivadas parciales de u y nos interesa la situación especial en que esta dependencia tiene lugar de manera no convexa.

Estudiaremos casos generales dados en la forma:

$$\phi(x, y, s, t) = \sum_{i=0}^{3m} a_i(x, y, u) t^i + \sum_{j=0}^{3n} b_j(x, y, u) s^j$$

donde la forma como el potencial ϕ depende de las derivadas parciales u_x y u_y se puede expresar como un polinomio específico para cada una de ellas, es decir es un polinomio *separable* en dos variables. Después de estudiar este tipo de problemas abordaremos la situación, cualitativamente más compleja, en la cual el potencial de energía de deformación puede ser descrito por cualquier polinomio arbitrario en dos dimensiones:

$$\phi(x, y, s, t) = \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{ij}(x, y, u) s^i t^j$$

Finalmente exploraremos, en alguna medida, el caso vectorial en el cual el potencial de deformación ϕ depende de la matriz gradiente

$$\vec{\nabla} u = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_1}{\partial y} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{pmatrix}$$

de un campo de deformaciones $u : \Omega \rightarrow R^2$ con componentes $u = (u_1, u_2)$. Estos análisis se desarrollarán cuidadosamente en los capítulos 5, 6 y 8.

Es muy interesante notar que a medida que el potencial de energía de deformación ϕ adquiere formas más complejas, el problema variacional subyacente (1) permite una gama más amplia en las posibles situaciones cualitativas. En primer lugar puede haber minimizadores para el problema, pero en caso de no haberlos, los posibles modos de oscilación en las sucesiones minimizantes son mucho más complejos. Si en el ejemplo de Bolza se reducían a dos posibles pendientes ± 1 determinadas por los valores mínimos de un potencial de energía de deformación unidimensional $\phi(t) = (1 - t^2)^2$, en un caso general como un polinomio bidimensional general ϕ debemos considerar todos los posibles valores mínimos para ϕ y todos los posibles modos de alternancia entre los vectores correspondientes a tales mínimos. Este problema es un problema de naturaleza altamente no lineal, pero puede explicarse y resolverse de una manera muy eficiente empleando técnicas de análisis convexo y optimización global que describiremos en el capítulo 5.

Después de presentar una motivación interesante para justificar el estudio de problemas variacionales no convexos en elasticidad no lineal, debemos presentar un planteamiento analítico riguroso que nos permita darle un formalismo teórico a las ideas que hemos presentado de una manera intuitiva. Este planteamiento, además de darnos los elementos conceptuales para entender el problema, debe darnos también un camino para su solución. La pregunta consecuente que sigue es: ¿qué tipo de solución?... si previamente hemos mencionado que es posible que el problema variacional bajo estudio carezca de minimizadores. Debemos entonces recalcar que lo que buscamos detrás del problema variacional de interés, es el comportamiento alternante en los gradientes de sus sucesiones minimizantes cuando éste carezca de minimizadores. Es correcto suponer que no habrá tal comportamiento oscilatorio cuando el problema posee minimizadores.

Puesto que el comportamiento oscilatorio en las sucesiones minimizantes de un problema variacional no convexo, carente de minimizadores, define el tipo de combinaciones que cabe esperar entre las varias posibles configuraciones cristalinas estables, correspondientes a los mínimos del potencial de energía de deformación ϕ , cuando el problema proviene del balance de energía en un cuerpo dado. Concluimos que esta información nos permitirá determinar la microestructura del material, es decir la forma como se combinan las diferentes fases sólidas para dar lugar a distribuciones con un menor costo energético [31, 5].

Para conseguir esta información utilizaremos una herramienta analítica muy poderosa que recoge simultáneamente la información que buscamos: el comportamiento oscilatorio de sucesiones minimizantes, en ausencia de minimizadores, y a la vez la microestructura del cuerpo en modelos de elasticidad no lineal.

Dado un problema variacional no convexo como el que representamos en (1), no podemos estudiarlo con métodos de análisis funcional como el método directo, teoría de perturbaciones o ecuaciones de Euler-Lagrange, debido a la no convexidad de su integrando en la variable gradiente de u . Para proceder usamos la teoría de medidas de Young [4, 5, 6, 7].

Dado un problema variacional como (1), cuyo integrando puede estar descrito como una función no convexa del gradiente de las funciones admisibles u , empleamos una familia de medidas de probabilidad parametrizadas por puntos del dominio de integración, denominadas medidas de Young. Una medida de Young es un conjunto ν definido como:

$$\nu = \{\mu_{x,y} : (x,y) \in \Omega\}$$

donde $\mu_{x,y}$ es una distribución de probabilidad en el plano para cada punto $(x,y) \in \Omega$. Con este tipo de objetos matemáticos proponemos un nuevo planteamiento para el problema variacional (1) en la siguiente forma: encontrar la medida de Young ν que logra el menor valor para el funcional generalizado:

$$\bar{I}(\nu) = \iint_{\Omega} \left\{ \iint_{\mathbb{R}^2} \phi(x,y;s,t) d\mu_{x,y}(s,t) + \psi(x,y;u) \right\} dx dy \quad (4)$$

donde la aparición de $u(x,y)$ se resuelve a partir de las condiciones de contorno y la restricción

$$\vec{\nabla} u(x,y) = \iint_{\mathbb{R}^2} (s,t) d\mu_{x,y}(s,t). \quad (5)$$

Este enfoque para abordar problemas variacionales no convexos en elasticidad, ha sido de un gran valor para aclarar la existencia de minimizadores y en principio permite determinar el comportamiento cualitativo y cuantitativo en las sucesiones minimizantes del problema cuando éste carece de solución. La teoría de medidas de Young predice que, a pesar de que el problema variacional original carezca de solución, su forma *relajada* como principio variacional generalizado (4), siempre tiene un minimizador ν^* que consecuentemente está compuesto de medidas de probabilidad parametrizadas óptimas:

$$\nu^* = \{\mu_{x,y}^* : (x,y) \in \Omega\}.$$

La medida de Young óptima ν^* contiene una información muy importante para entender el análisis del problema variacional en cuestión [4].

En primer lugar, ν^* decide por completo la existencia de minimizadores para el problema variacional no convexo (1). Específicamente, si cada medida óptima $\mu_{x,y}^*$ es una distribución de Dirac:

$$\mu_{x,y}^* = \delta_{\vec{F}(x,y)}$$

compuesta por un solo punto de soporte $\vec{F}(x,y)$ en el plano s - t , entonces el problema admite minimizadores cuyos gradientes están dados por la función vectorial

$$(x,y) \rightarrow \vec{F}(x,y) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2.$$

Recíprocamente, si el problema admite un minimizador u^* , entonces su gradiente proporciona una familia parametrizada de medidas de probabilidad óptimas, con la propiedad de que todas ellas son medidas de Dirac cuyo soporte está definido por el gradiente del minimizador u^* , es decir que:

$$\mu_{x,y}^* = \delta_{\vec{\nabla} u^*(x,y)} \quad \text{para cada } (x,y) \in \Omega$$

es una medida de Young óptima para el problema generalizado (4).

En el caso en que la medida de Young ν^* , que es solución al principio variacional generalizado (4), no esté formada únicamente por medidas de Dirac, entonces concluimos que el problema variacional (1) no admite minimizadores en un espacio de funciones admisibles particular (espacios de Sobolev en este caso). Pero por otra parte, las medidas parametrizadas óptimas que la conforman: $\mu_{x,y}^*$ recogen la información que permite determinar el comportamiento cualitativo y cuantitativo de las sucesiones minimizantes para el problema variacional no convexo (1). En concreto, argumentos propios de análisis convexo nos permiten afirmar que cada medida parametrizada óptima $\mu_{x,y}^*$ está soportada en un número de puntos muy reducido, normalmente relacionado con la dimensión del espacio en que se describe el problema. Por ejemplo, para problemas en dos dimensiones podríamos suponer que este número de puntos de soporte es tres:

$$\mu_{x,y}^* = p_1 \delta_{\vec{A}} + p_2 \delta_{\vec{B}} + p_3 \delta_{\vec{C}} \quad (6)$$

donde p_1, p_2 y p_3 son valores positivos que representan una distribución de probabilidad y los vectores $\vec{A}$, $\vec{B}$ y $\vec{C}$ son los puntos de soporte en el plano.

Teniendo muy en cuenta este hecho y considerando que esta situación puede variar de diferentes maneras cuando el punto (x,y) recorre diferentes regiones del dominio Ω , podemos dar una estimación cualitativa y cuantitativa del comportamiento oscilatorio inducido por cambios en el gradiente de las sucesiones minimizantes. Específicamente, si $\{u_n\}$ es una sucesión minimizante para el problema variacional no convexo (1), la sucesión correspondiente a sus gradientes: $\vec{\nabla} u_n(x,y)$ debe tomar alternativamente los vectores $\vec{A}$, $\vec{B}$ y $\vec{C}$ con frecuencias p_1 , p_2 y p_3 respectivamente, en torno a una vecindad del punto $(x,y) \in \Omega$. Como veremos esta información permite construir de manera apropiada sucesiones minimizantes para problemas variacionales no convexos. Ver [3, 4] para una cuidadosa explicación de la aplicación de la teoría de medidas de Young a problemas variacionales no convexos en elasticidad no lineal.

Desde el punto de vista de un modelo energético para un problema de elasticidad, las medidas parametrizadas óptimas $\mu_{x,y}^*$ proporcionan la información pertinente a la microestructura del material. Si en un punto $(x,y) \in \Omega$ la medida óptima está dada por la distribución de probabilidad (6), entonces los puntos $\vec{A}$, $\vec{B}$ y $\vec{C}$ representan las configuraciones estables para la red cristalina y las probabilidades p_1, p_2 y p_3 representan las proporciones en que tales configuraciones estables se presentarán en la región del punto (x,y) del dominio Ω . Esta información en su conjunto permite determinar la microestructura del material, porque con ella determinamos en qué proporciones aparece cada fase sólida del material en cada punto del cuerpo.

Atendiendo al hecho que la información recogida en las medidas parametrizadas óptimas para el problema variacional generalizado (4), correspondiente al problema variacional no convexo (1), representa exactamente la conformación de la microestructura del material impuesta por la minimización de un balance de energía. Tomaremos como modelo para representar microestructuras a las medidas parametrizadas óptimas $\mu_{x,y}^*$ que conforman la medida de Young solución al problema variacional generalizado (4). De esta manera la palabra *microestructura* no se referirá más a una formación de carácter microscópico que combina diferentes fases sólidas de una aleación a lo largo de un cuerpo, sino que con pleno sentido se referirá a la medida de Young óptima que resuelve el problema variacional generalizado (4), planteado a partir de un principio variacional no convexo (1), utilizado como modelo para el balance de energía en un cuerpo con potencial de energía de deformación no convexo ϕ . En este sentido nos acogemos a la terminología de Muller [5].

Esto nos permite plantear con precisión el objeto central de esta monografía: el cálculo explícito de una microestructura, a partir de problemas variacionales no convexos, como modelos de balances energéticos en elasticidad no lineal. Explicaremos ahora el método de *relajaciones semidefinidas* para alcanzar este objetivo.

Una vez hemos fijado que nuestro objetivo central es el cálculo de la medida de Young óptima para el principio variacional generalizado (4), la cual representa la microestructura de un cuerpo cuyo balance energético está dado por un problema variacional no convexo como (1), debemos presentar un método específico para el cálculo de las medidas parametrizadas óptimas $\mu_{x,y}^*$ que determinan la microestructura del material, atendiendo a su forma general como aparece en la expresión (6). El método de relajaciones semidefinidas está diseñado específicamente para resolver este problema.

El método de relajaciones semidefinidas utiliza resultados matemáticos muy profundos propios del análisis convexo y del álgebra moderna. Dicho método está basado en la siguiente observación: cuando el potencial de energía de deformación ϕ puede expresarse como un polinomio en los argumentos (s, t) , para las derivadas parciales de la función admisible u :

$$\phi(x, y, s, t) = \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{ij}(x, y) s^i t^j$$

entonces el problema generalizado (4) toma la forma

$$\bar{J}(m) = \iint_{\Omega} \left\{ \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{ij}(x, y) m_{i,j}(x, y) + \psi(x, y; u) \right\} dx dy \quad (7)$$

donde $m_{i,j}(x, y)$ son los momentos algebraicos de las medidas parametrizadas que conforman la medida de Young $\nu = \{\mu_{x,y} : (x, y) \in \Omega\}$, específicamente:

$$m_{i,j}(x, y) = \iint_{\Omega} s^i t^j d\mu_{x,y}(s, t).$$

Esta transformación es de gran utilidad porque permite replantear el problema variacional generalizado (4), como un problema de optimización en una nueva familia de variables $m_{ij}(x, y)$, las cuales a su vez deben representar los momentos algebraicos bidimensionales de la medida de probabilidad parametrizada $\mu_{x,y}$. Este procedimiento implica conocer una caracterización apropiada de los momentos algebraicos, en varias dimensiones, de una medida de probabilidad, un problema profundo, aún en estudio, en álgebra moderna denominado: *Problema de los Momentos Truncados Multidimensionales* [8, 9, 10]. Sin embargo, existen resultados parciales sobre este delicado problema, que nos permitirán continuar adelante nuestro propósito de estudiar el problema de optimización determinado por la minimización del funcional (7), sujeto a la condición (5) que en las nuevas variables de momentos toma la forma:

$$\vec{\nabla} u(x, y) = (m_{10}(x, y), m_{01}(x, y)).$$

Sin entrar en detalles particulares, podremos afirmar que una familia de valores

$$\{m_{i,j} : 0 \leq i + j \leq 2n\}$$

corresponde a los momentos de una medida de probabilidad, cuando la forma cuadrática

$$c \rightarrow \sum_{0 \leq i+j \leq n} \sum_{0 \leq i'+j' \leq n} c_{i,j} c_{i',j'} m_{i+i', j+j'}$$

es semidefinida positiva. Por lo tanto esto nos da la manera explícita de plantear la minimización del problema (5) como el siguiente problema de control:

$$\begin{aligned} \min_m \bar{J}(m) &= \iint_{\Omega} \left\{ \sum_{0 \leq i+j \leq 2n} c_{ij}(x, y) m_{ij}(x, y) + \psi(x, y; u) \right\} dx dy \\ &\text{s. a} \\ \vec{\nabla} u(x, y) &= (m_{10}(x, y), m_{01}(x, y)) \\ &\text{y además s. a} \\ (m_{i+i', j+j'} : 0 \leq i + j \leq n, \quad 0 \leq i' + j' \leq n) \end{aligned} \tag{8}$$

que es una forma cuadrática semidefinida positiva.

Este nuevo problema de optimización recoge toda la información del problema generalizado, pero a la vez, tiene una forma mucho más conveniente para ser estudiado: se trata de un problema de control óptimo en el cual las variables de control $m_{i,j}$ tienen una estructura convexa [11]. Por lo cual, la teoría de control óptimo nos asegura que tiene solución. Notamos que este también era el caso para el problema generalizado (4) del cual procede. La ventaja radica en que los problemas de control óptimo tienen un formato más manejable debido a que están definidos en funciones, no en distribuciones como era el caso para los problemas generalizados. Dada la caracterización que hemos utilizado para

las variables $m_{i,j}$ como momentos de distribuciones de probabilidad bivariadas, en términos de formas cuadráticas semidefinidas positivas, llamaremos al nuevo problema (8) una *relajación semidefinida* del problema no convexo original (1), utilizado como modelo energético en elasticidad no lineal.

El propósito de esta investigación es abrir una vía de solución para estos complejos problemas de optimización no lineal. Pero resaltando cuidadosamente que la solución explícita al problema de control óptimo (8) no es por si misma suficiente para determinar la microestructura subyacente al modelo de elasticidad. Como hemos señalado, la microestructura está determinada por la forma constitutiva de cada medida de Young óptima como está descrito en la expresión (6). Una de las conclusiones más interesantes de nuestro trabajo, es que la forma explícita de cada medida parametrizada óptima (microestructura) puede obtenerse a partir de la solución

$$m^* = \{m_{i,j}^*(x, y) : (x, y) \in \Omega, \quad 0 \leq i + j \leq 2n\}$$

al problema de control óptimo (8). Esto se consigue con una cuidadosa implementación de métodos algebraicos sobre las variables de momentos bidimensionales óptimos

$$\{m_{i,j}^*(x, y) : 0 \leq i + j \leq 2n\}$$

en cada punto (x, y) del dominio Ω . Abordaremos esta cuestión en los capítulos 3 y 5.

Puede verse con claridad, que una etapa fundamental de todo el proceso, consiste en la solución al problema de optimización (8). Este problema exige un cuidadoso planteamiento en forma discreta como un programa matemático. Lo cual exige una discretización del dominio Ω en una malla de puntos (x_k, y_l) , para cada uno de los cuales existe una familia de variables $m_{i,j}(x_k, y_l)$ que representan los momentos algebraicos bidimensionales, de la medida parametrizada μ_{x_k, y_l} por el punto (x_k, y_l) . Además debemos imponer dentro del modelo discreto, como programa matemático, las condiciones apropiadas que garantizan la definición positiva de todas las formas cuadráticas

$$(m_{i+i', j+j'}(x_k, y_l) : 0 \leq i + j \leq n, \quad 0 \leq i' + j' \leq n)$$

para cada uno de los puntos de la malla. Adicionalmente es necesario imponer en forma de ecuaciones algebraicas la condición gradiente sobre $(m_{10}(x, y), m_{01}(x, y))$ como aparece en (8). Esto implica la resolución numérica de enormes programas matemáticos, no lineales, con técnicas computacionales apropiadas para ello.

Es así como una buena parte de nuestro trabajo se orientó a poner a punto sofisticados algoritmos de programación no lineal, sobre los modelos discretos que representan las relajaciones semidefinidas propias de problemas generalizados, provenientes a su vez de modelos variacionales en elasticidad no lineal. En el desarrollo de este objetivo hemos utilizado lenguajes de optimización como AMPL y GAMS, además de librerías especializadas de programación semidefinida [12, 13, 14]. Esto ha constituido una tarea de naturaleza práctica de gran exigencia en el campo de la optimización numérica. Hacemos un recuento de esta labor en los capítulos 9, 10 y 11.

En el capítulo 1 presentamos los elementos de análisis convexo, teoría de momentos y relajación semidefinida que servirán como hilo conductor para todo el trabajo.

Capítulo 1

Análisis Convexo, Problemas de Momentos y Relajaciones Semidefinidas

En este capítulo veremos cómo se unen diferentes métodos y resultados fundamentales de matemáticas modernas para darle una respuesta coherente al propósito de esta investigación: proporcionar los métodos de cálculo apropiados para obtener la microestructura en problemas variacionales no convexos propios de la teoría de la elasticidad. Los elementos más importantes de este desarrollo proceden del análisis convexo, la teoría de momentos algebraicos y desarrollos recientes en programación matemática, donde se ha estudiado una familia particular de programas convexos denominados: programas semidefinidos, los cuales están basados en la descripción de conjuntos factibles mediante conos de matrices semidefinidas positivas.

En primer lugar, uno de los conceptos de mayor utilidad para nosotros es el de envoltura convexa de una función continua $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definida en un espacio euclidiano. Esperamos que esta función tenga una propiedad particular denominada *coercividad*, la cual implica que cuando la variable independiente x se aleje en alguna dirección, esto es $\|x\| \rightarrow \infty$, los valores de $f(x)$ también crecerán sin cota, pero a una rapidez mayor que el crecimiento de x . Bajo este supuesto, la envoltura convexa de f es la mayor función convexa f_c que es inferior a f . Así tenemos que $f_c = f$ si y sólo si f es convexa, $f_c \leq f$ en general, y además $g \leq f_c$ siempre que g sea convexa e inferior a f .

Las funciones convexas involucran procesos de integración a través de la *desigualdad de Jensen*: f es convexa si y sólo si

$$f\left(\int_{\mathbb{R}^n} s \, d\mu(s)\right) \leq \int_{\mathbb{R}^n} f(s) \, d\mu(s) \quad (1.1)$$

para cada distribución de probabilidad μ . Como caso particular, decimos que f

es una función convexa si y sólo si:

$$f(\lambda_1 a^1 + \cdots + \lambda_k a^k) \leq \lambda_1 f(a^1) + \cdots + \lambda_k f(a^k) \quad (1.2)$$

cuando $a^1, \dots, a^k$ son puntos arbitrarios en $\mathbb{R}^n$ y $\lambda_1, \dots, \lambda_k$ son valores positivos que suman la unidad: $\lambda_1 + \cdots + \lambda_k = 1$. Bajo estas condiciones la expresión $\lambda_1 a^1 + \cdots + \lambda_k a^k$ se denomina una combinación convexa, pero es evidente que sus elementos constitutivos permiten describir una distribución de probabilidad discreta.

$$\mu = \sum_{i=1}^k \lambda_i \delta_{a^i} \quad (1.3)$$

donde los puntos a^i son los eventos y los valores λ_i son sus respectivas probabilidades. Técnicamente decimos que a^i es el soporte de la medida de Dirac δ_{a^i} y que el conjunto $\{a^1, \dots, a^k\}$ es el soporte de la distribución de probabilidad μ . Observe que si μ es tomada como en la expresión (1.3), entonces la desigualdad de Jensen (1.1) toma la forma dada en (1.2).

Las combinaciones convexas son un concepto de trabajo esencial en análisis convexo. Dado un conjunto $A \subset \mathbb{R}^n$, su clausura convexa es la colección de todas las combinaciones convexas formadas con puntos de A . A este conjunto lo denominamos $\text{co}(A)$ y fácilmente observamos que es el menor conjunto convexo que contiene al conjunto A . Así vemos que A es convexo si y sólo si $A = \text{co}(A)$, en general $A \subset \text{co}(A)$ y $\text{co}(A) \subset B$ siempre que B sea convexo y $A \subset B$. Uno de los resultados más interesantes en análisis convexo es el teorema de Caratheodory, según el cual cada punto en la envoltura convexa de A puede describirse como una combinación convexa de $n+1$ puntos en A o incluso menos:

$$\text{co}(A) = \{\lambda_1 a^1 + \cdots + \lambda_k a^k : k \leq n+1\}. \quad (1.4)$$

Las implicaciones de este resultado son muy profundas porque nos dice que toda figura convexa puede describirse con un número reducido de elementos que la definen. Es un resultado análogo a los resultados que incorporan la *dimensión* en álgebra lineal. Para más detalles sobre los fundamentos del análisis convexo puede remitirse a [15].

El análisis convexo relaciona de una manera muy clara el concepto de *clausura convexa* para conjuntos, con el concepto de *envoltura convexa* para funciones:

$$\text{co}(\text{Epi}(f)) = \text{Epi}(f_c) \quad (1.5)$$

donde $\text{Epi}(f)$ representa el epígrafe de la función coerciva $f: \mathbb{R}^{n+1} \rightarrow \mathbb{R}$. Este es el conjunto de puntos en $\mathbb{R}^{n+1}$ encima y sobre la gráfica de la función f :

$$\text{Epi}(f) = \{(x, t) \in \mathbb{R}^{n+1} : t \geq f(x)\}. \quad (1.6)$$

La expresión (1.5) indica que para funciones coercivas es equivalente tomar su envoltura convexa y luego su epígrafe, que tomar su epígrafe primero y luego la clausura convexa de éste como conjunto. Esta relación será de gran importancia en el desarrollo de este trabajo.

En especial, si fijamos un punto $(a, f_c(a))$ en $\mathbb{R}^{n+1}$, evidentemente él hace parte de la clausura convexa del conjunto $\text{Epi}(f)$, por lo tanto podemos expresar al punto $(a, f_c(a))$ como una combinación convexa de $n+2$ puntos en $\text{Epi}(f)$. Con un breve análisis adicional [15] podemos asegurar que el punto $(a, f_c(a))$ sobre la gráfica de f_c puede expresarse como una combinación convexa de $n+1$ puntos a lo sumo, ubicados sobre la gráfica de f , esto quiere decir que la expresión:

$$(a, f_c(a)) = \sum_{i=1}^{n+1} \lambda_i (a^i, f(a^i)) \quad (1.7)$$

es cierta para una colección de $n+1$ puntos $a^i \in \mathbb{R}^n$ o menos, y valores positivos correspondientes λ_i que suman la unidad.

En este trabajo será de suma importancia el problema de identificar los puntos a^i junto con los valores λ_i que hacen cierta la expresión (1.7) en forma de una combinación convexa, donde la única información disponible es el punto a en el cual queremos *analizar* la envoltura convexa de f . Por esta razón hemos denominado a este problema el *análisis de la envoltura convexa de la función f en el punto a* . A pesar de su claro sentido geométrico, este es un delicado problema de naturaleza no lineal, el cual tendrá implicaciones muy delicadas en problemas de optimización no lineal [16, 17].

Para afrontar este problema acudimos a un planteamiento propio de análisis convexo [15] según el cual los puntos a^i y λ_i se pueden caracterizar como la combinación convexa que hace mínima la expresión

$$\lambda_1 f(a^1) + \cdots + \lambda_k f(a^k) \quad (1.8)$$

mientras cumple con la restricción

$$a = \lambda_1 a^1 + \cdots + \lambda_k a^k. \quad (1.9)$$

Pero si aceptamos que cada combinación convexa puede representarse como una distribución de probabilidad discreta, como hemos visto en (1.3) y además recordamos que cada distribución de probabilidad puede aproximarse por una distribución discreta, entonces el análisis de la envoltura convexa en el punto a toma la forma de un problema general de optimización convexa:

$$\min_{\mu \in P(\mathbb{R}^n)} \int f(s) d\mu(s) \quad \text{s. a.} \quad \int s d\mu(s) = a \quad (1.10)$$

donde $P(\mathbb{R}^n)$ es la familia de todas las medidas de probabilidad regulares de Borel en el espacio euclidiano $\mathbb{R}^n$.

Es un resultado profundo pero muy interesante dentro de nuestra línea de investigación, el hecho de que la medida óptima que resuelve el problema (1.10) sea justamente la distribución de probabilidad discreta, dada en la forma (1.3), cuyos puntos de soporte a^i y cuyas probabilidades λ_i resuelven el problema no lineal (1.7) que define el análisis de la envoltura convexa de la función coerciva f en el punto a . Este resultado es un pilar fundamental para el trabajo y los métodos propuestos dentro de esta investigación.

Si nos remontamos a la introducción, recordaremos que el cálculo de una microestructura se determina a partir de la expresión que representa una medida de probabilidad óptima, parametrizada por las variables del dominio del problema físico. Observe que la expresión (6) es un caso particular de la expresión (1.3) para funciones en el plano: $n = 2$. Esto quiere decir, que el método para calcular microestructuras está basado en un problema de optimización en medidas, que representa el estudio de los componentes geométricos de la envoltura convexa de una función en un punto particular, tal como refleja la ecuación (1.7). En pocas palabras, encontrar los elementos que aparecen en la expresión (6), es un problema equivalente a resolver la expresión (1.7) que determina la forma en que un punto sobre una envoltura convexa se puede representar como una combinación convexa de puntos sobre la gráfica de la función en cuestión. Pero a la vez resaltamos, que la solución a dicho problema está dada por la solución a un problema de optimización en medidas como el que aparece descrito en (1.10).

La pregunta subsiguiente es cómo abordar problemas de optimización abstractos como (1.10) que están definidos en términos de medidas de probabilidad. La respuesta nos conduce a un segundo problema fundamental en matemáticas contemporáneas: el Problema de los Momentos. Aunque no podremos resolver el problema (1.10) para todo tipo de funciones coercivas, nos concentraremos tan solo en polinomios, los cuales son aún una gran familia de funciones, dentro de la cual podemos encontrar modelos válidos para una buena cantidad de problemas físicos.

Supondremos que f es un polinomio de grado par definido en dos variables:

$$f(x, y) = \sum_{0 \leq i+j \leq 2n} c_{ij} x^i y^j \quad (1.11)$$

donde el supuesto de coercividad implica: $c_{2n,0}, c_{0,2n} > 0$. Entonces si planteamos el problema (1.10) sobre esta función polinomial f , encontramos que cada integral toma la forma

$$\sum_{0 \leq i+j \leq 2n} c_{ij} m_{ij} \quad (1.12)$$

donde las variables m_{ij} representan los momentos algebraicos bidimensionales de la medida de probabilidad $\mu \in P(\mathbb{R}^2)$. De esta manera el problema de optimización (1.10) se transforma en el programa matemático:

$$\min_{m \in M(\mathbb{R}^2)} \sum_{0 \leq i+j \leq 2n} c_{ij} m_{ij} \quad (1.13)$$

donde $M(\mathbb{R}^2)$ es la familia de vectores bi-indexados $m = (m_{ij} : 0 \leq i+j \leq 2n)$ cuyas entradas corresponden a los momentos algebraicos de medidas de probabilidad soportadas en el plano.

Es importante darse cuenta que el problema de optimización (1.10), definido en medidas de probabilidad, cambió por el problema equivalente (1.13) pero tomó la forma natural de un programa matemático convexo. Esto es evidente

porque la función objetivo en (1.13) es lineal y el conjunto factible es convexo: observe que la aplicación

$$\mu \mapsto (m_{ij} : 0 \leq i + j \leq 2n) : P(\mathbb{R}^2) \rightarrow M(\mathbb{R}^2) \subset \mathbb{R}^{(2n+1)(n+1)} \quad (1.14)$$

es una transformación lineal, por lo tanto lleva al conjunto convexo $P(\mathbb{R}^2)$ sobre el conjunto convexo $M(\mathbb{R}^2)$. Aunque esta observación teórica determina que el conjunto factible $M(\mathbb{R}^2)$ es un conjunto convexo en el espacio euclidiano $\mathbb{R}^{(2n+1)(n+1)}$, no es evidente cómo podemos caracterizar sus variables de diseño $m_{i,j}$ para que representen los momentos algebraicos de distribuciones bivariadas. Este es un problema muy complejo aún en estudio [18, 19, 20]. Sin embargo algunos resultados parciales nos permitirán avanzar en la dirección de considerar el programa matemático (1.13) como una representación del problema (1.10).

Una forma bastante confiable de caracterizar las variables $m_{i,j}$ como momentos algebraicos, es imponiendo la condición que la forma cuadrática

$$c \mapsto \sum_{0 \leq i+j \leq n} \sum_{0 \leq i'+j' \leq n} c_{ij} c_{i'j'} m_{i+i', j+j'} : \mathbb{R}^{\frac{(n+1)(n+2)}{2}} \rightarrow \mathbb{R} \quad (1.15)$$

sea semidefinida positiva [9, 21]. Por lo tanto, el programa matemático (1.13) toma la forma de un programa semidefinido:

$$\begin{aligned} \min_{m \in M(\mathbb{R}^2)} \quad & \sum_{0 \leq i+j \leq 2n} c_{ij} m_{ij} \quad \text{s.a.} \\ & (m_{i+i', j+j'} : 0 \leq i+j \leq n, \quad 0 \leq i'+j' \leq n), \end{aligned} \quad (1.16)$$

es semidefinida positiva. La programación semidefinida es un tipo particular de programación cónica, en la cual el conjunto factible subyacente hace parte de un cono definido por combinaciones lineales de matrices que deben ser semidefinidas positivas. Esta estructura se conoce como LMI (linear matrix inequalities) y será estudiada con detalle en el Capítulo 6 y en el Capítulo 11.

Uno de los resultados más importantes de la investigación que adelantamos, es que la solución al programa semidefinido (1.16), ésta corresponde a los momentos algebraicos de la medida de probabilidad óptima que resuelve el problema de optimización (1.10), la cual a su vez representa a la combinación convexa que valida la expresión (1.7). Esta es justamente la información que buscamos para determinar una microestructura en el sentido de la expresión (6) que son los modos normales de oscilación en las sucesiones minimizantes de un problema variacional no convexo en elasticidad no lineal.

Empleando métodos algebraicos adecuados, podremos reconstruir la medida óptima del problema (1.10), a partir de los valores óptimos $m_{i,j}^*$ que forman la solución del programa semidefinido (1.16). Este es el fundamento que hay detrás de los métodos de relajación semidefinida para abordar problemas variacionales no convexos en elasticidad. Este procedimiento será aplicado en el Capítulo 6 para resolver las envolturas convexas de polinomios bidimensionales, en el sentido de que la medida óptima μ^* para (1.10) cumple con

$$f_c(a) = \int_{\mathbb{R}^n} f(s) d\mu^*(s) = \lambda_1 f(a^1) + \cdots + \lambda_k f(a_k), \quad (1.17)$$

y así la solución al programa semidefinido (1.16) nos permitirá encontrar los puntos a^i y los valores λ_i que definen a la medida óptima μ^* como una distribución de probabilidad discreta definida como:

$$\mu^* = \sum_{i=1}^k \lambda_i \delta_{a^i}. \quad (1.18)$$

Este procedimiento para resolver el análisis de envolturas convexas de polinomios, reduciéndolo a la solución de un programa semidefinido, para luego aplicar, sobre la solución encontrada, algunos métodos algebraicos, es el pilar fundamental en el método de relajaciones semidefinidas para calcular microestructuras. Ampliaremos este punto a continuación.

Supongamos que nos enfrentamos a un problema variacional no convexo en la forma

$$\min_u I(u) = \iint_{\Omega} f(\vec{\nabla} u(x, y)) \, dx dy \quad \text{s.a.} \quad u = g \quad \text{en} \quad \partial\Omega \quad (1.19)$$

donde la función f puede representar un potencial de deformación para algún tipo de material y suponiendo que f pueda representarse como un polinomio bidimensional en la forma general (1.11), entonces es fácil mostrar que el análisis de la envoltura convexa de f en el punto

$$a = (a_1, a_2) = \int_{\partial\Omega} g \cdot d\vec{r} \quad (1.20)$$

proporciona las posibles formas de oscilación o los minimizadores (de haberlos) para el problema variacional (1.19).

Si la envoltura convexa de f en el punto a admite la descripción:

$$f_c(a) = \lambda_1 f(a^1) + \lambda_2 f(a^2) + \lambda_3 f(a^3) \quad (1.21)$$

donde

$$\begin{aligned} \lambda_1 a^1 + \lambda_2 a^2 + \lambda_3 a^3 &= a \\ \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 &= 1 \\ \lambda_i &> 0 \end{aligned} \quad (1.22)$$

entonces la construcción del minimizador para I debe cuidar que el gradiente de u tome los valores a^1, a^2 y a^3 en las proporciones λ_1, λ_2 y λ_3 , respectivamente, sobre el dominio Ω . Si esto es compatible con las condiciones de frontera, tendremos minimizadores y un tipo particular de microestructura, en la cual las configuraciones estables a^1, a^2 y a^3 se agrupan en regiones específicas del cuerpo.

En el caso contrario, en que no sea posible repartir los gradientes a^1, a^2 y a^3 en las proporciones λ_1, λ_2 y λ_3 y a la vez cumplir con las condiciones de frontera, la minimización del integrando I tendrá lugar a través de una serie de sucesiones minimizantes que intentarán ajustar y hacer compatible la distribución de los gradientes con las condiciones de frontera, lo cual dará lugar

a una microestructura más compleja en la cual las configuraciones estables a^1 , a^2 y a^3 se entremezclarán en regiones particulares, en escalas de tamaño cada vez más finas, siguiendo las proporciones λ_1 , λ_2 y λ_3 para sus gradientes.

Este análisis se aplica a las situaciones más complejas donde debemos abordar problemas variacionales no convexos que son modelos para problemas de elasticidad no lineal, los cuales tienen la forma general:

$$\min_u I(u) = \iint_{\Omega} \left\{ \phi(x, y, \vec{\nabla} u) + \psi(x, y, u) \right\} dx dy \quad (1.23)$$

donde el potencial de energía de deformación puede depender de manera no convexa del estado de deformaciones dado por el gradiente de la función admisible u .

Nuevamente, si aceptamos que el potencial de energía de deformación ϕ tiene una forma general dada por una expresión polinomial en dos variables:

$$\phi(x, y, s, t) = \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j}(x, y) s^i t^j \quad (1.24)$$

entonces, el funcional generalizado en medidas de Young

$$\bar{I}(\nu) = \iint_{\Omega} \left\{ \iint_{\mathbb{R}^2} \phi(x, y, s, t) d\mu_{x,y}(s, t) + \psi(x, y, u) \right\} dx dy \quad (1.25)$$

se transforma en el problema de control óptimo:

$$\bar{I}(m) = \iint_{\Omega} \left\{ \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j}(x, y) m_{i,j}(x, y) + \psi(x, y, u) \right\} dx dy \quad (1.26)$$

donde las variables de control $m_{i,j}$ deben estar restringidas por desigualdades lineales matriciales que las caracterizan como los momentos bidimensionales de medidas de probabilidad en el plano. Este nuevo problema de optimización lo hemos llamado: relajación semidefinida del problema original (1.23).

Resaltamos que su solución $m_{i,j}^*(x, y)$ permite reconstruir los componentes de cada medida parametrizada óptima

$$\mu_{x,y}^* = \lambda_1 a^1 + \lambda_2 a^2 + \lambda_3 a^3 \quad (1.27)$$

que en su conjunto conforman la medida de Young óptima para el funcional generalizado $\bar{I}$:

$$\nu^* = \{ \mu_{x,y}^* : (x, y) \in \Omega \} \quad (1.28)$$

que a su vez determina la microestructura para el modelo variacional (1.23). Observamos que los gradientes a^1 , a^2 y a^3 determinan los modos de oscilación presentes en las sucesiones minimizantes para el funcional I en torno al punto (x, y) del dominio Ω .

En resumen, resaltamos que el análisis de las componentes de una envoltura convexa de una función polinomial, conforman el problema central y recurrente

a lo largo de esta propuesta. Además la forma de enfrentarse a él tiene un esquema general: planteamiento de un problema de optimización en medidas de probabilidad, re-planteamiento en forma de un programa convexo en término de desigualdades matriciales o relajaciones semidefinidas, y finalmente, manipulación algebraica de los resultados para construir la combinación convexa que contiene la información acerca de los minimizadores o de las sucesiones minimizantes del problema original.

Desarrollaremos este programa en sus diferentes contextos a lo largo de esta investigación. En el Capítulo 2 veremos los fundamentos físicos que nos llevan a las consideraciones apropiadas acerca de la geometría no convexa de los potenciales de energía de deformación en aleaciones cristalinas. En el Capítulo 3 desarrollaremos la metodología pertinente para analizar problemas variacionales no convexos en una dimensión. En el Capítulo 4 aplicaremos esta metodología para obtener la microestructura en una probeta a partir de potenciales de deformación empíricos, obtenidos de datos experimentales sobre el material que la conforma. En el Capítulo 5 desarrollaremos la metodología del método de los momentos para desarrollar el análisis de envolturas convexas bidimensionales, con lo cual daremos respuestas explícitas a problemas generales descritos en la forma (1.19). En el Capítulo 6 desarrollaremos la metodología apropiada para abordar problemas variacionales no convexos en dos dimensiones. En el Capítulo 7 aplicaremos esta técnica para encontrar la microestructura subyacente en problemas variacionales no convexos en dos dimensiones. En el Capítulo 8 exploraremos las técnicas desarrolladas para analizar problemas variacionales no convexos vectoriales, mediante la estimación computacional de la envoltura policonvexa de potenciales de energía de deformación definidos en matrices de deformación.

Puesto que el trabajo propuesto implica una componente computacional bastante pesada, debido a que la mayoría de programas matemáticos que resultan son problemas de optimización no lineales en un gran número de variables, en los capítulos subsecuentes hemos ilustrado diferentes herramientas computacionales que han sido útiles para resolver algunos modelos discretos que permiten realizar el cálculo de las microestructuras subyacentes a problemas variacionales no convexos en elasticidad. Es así como en el Capítulo 9 hacemos una introducción al lenguaje AMPL e ilustramos sus propiedades y ventajas desarrollando con él un modelo que permite calcular una microestructura particular. De igual manera en el Capítulo 10 hacemos una introducción al lenguaje de modelado GAMS y desarrollamos con él un modelo discreto que proviene de un principio variacional no convexo y dará lugar a una microestructura particular. Finalmente, en el Capítulo 11 presentamos los fundamentos de la programación semidefinida y desarrollamos algunos ejemplos con rutinas profesionales para encontrar la microestructura subyacente a problemas bidimensionales a través del análisis de envolturas convexas.

Capítulo 2

Fundamentos Físicos

En este capítulo sentamos las bases físicas necesarias para modelar el comportamiento de cuerpos metálicos bajo el efecto de esfuerzos más allá del rango elástico del material. El objetivo principal es darle al lector el vocabulario y los conceptos básicos necesarios para poder abordar un problema de elasticidad no lineal. En la primera parte hacemos una breve descripción de la forma como se estructura la materia (sección 2.1). Esta sección está dividida en varios apartados que introducen al lector en los elementos atómicos de la materia y avanzan hacia el entendimiento de los fenómenos macroscópicos que tienen lugar en materiales, particularmente en elementos estructurales compuestos de acero. Comenzamos (sección 2.1.1) haciendo una breve explicación de la mecánica cuántica, teoría que nos dará las herramientas necesarias para entender el comportamiento de los electrones en un átomo y que provee una justificación teórica a la configuración electrónica de los elementos de la tabla periódica. Seguidamente, en 2.1.2, explicamos los tipos de interacciones o enlaces que se dan entre átomos, aunque este tipo de enlaces se pueden tratar utilizando la teoría cuántica, el nivel de complejidad que se adquiere es considerable y optamos por seguir el tratamiento clásico convencional: tratar los átomos como esferas rígidas de radio R . Utilizando los conceptos de la sección previa, describimos las estructuras cristalinas más comunes de la materia y los comportamientos que se derivan de estos (sección 2.1.3); en particular nos dedicamos al entendimiento de las estructuras fcc, bcc y hcp. Las siguientes dos secciones (2.1.4 y 2.1.5) tratan de las formas como se organiza y como se describe la materia, introducimos el concepto de empaquetamiento cercano y discutimos los mecanismos por los cuales se pueden generar aleaciones de materiales. Por último describimos los tipos de imperfecciones que se presentan en los materiales; en particular discutimos detalladamente los tipos de dislocaciones que se presentan en estos ya que estas son las responsables de la deformación plástica que sufren los metales. Esto completa las herramientas teóricas que se utilizan para describir el comportamiento de los materiales sólidos y en particular de metales.

A continuación en 2.2 discutimos los mecanismos de formación del acero y describimos las diferentes fases que se presentan en el hierro puro, esto con el

fin de mostrar que existen varias configuraciones energéticas posibles para una aleación de hierro-carbono.

En 2.3 hacemos un recuento de las herramientas fenomenológicas que se utilizan actualmente para el estudio de cuerpos sólidos. En particular introducimos la máquina universal y el diagrama esfuerzo-deformación que se obtiene de los experimentos hechos con ella. Discutimos también, en términos de los conceptos de las secciones anteriores, los mecanismos microscópicos que son responsables de los comportamientos particulares que presentan las aleaciones de acero con contenido de bajo carbono.

Seguidamente en 2.4 planteamos un modelo variacional para el estudio de una barra unidimensional con condiciones de frontera bien definidas i.e., una barra delgada de material bajo la acción de una máquina universal. Hacemos una breve discusión de las dificultades que se pueden presentar al tratar este problema con las herramientas convencionales del cálculo de variaciones y proponemos la solución a partir de la teoría de momentos sobre medidas de Young. Por último presentamos un breve análisis sobre las características de convexidad que deben cumplir los potenciales de energía de deformación para materiales que tienen diferentes fases sólidas que pueden coexistir a iguales temperaturas. Esta sección justifica la necesidad de estudiar problemas variacionales que representan balances energéticos con métodos diferentes a los métodos directos o la teoría de perturbaciones que habitualmente se emplean.

2.1. Descripción Básica de Materiales

La Mecánica Clásica Newtoniana es adecuada para describir la dinámica de objetos macroscópicos que se mueven a velocidades pequeñas comparadas con la de la luz en el vacío ($c \approx 3 \times 10^8 \text{m/s}$), para describir el comportamiento de objetos que se mueven a velocidades comparables a c debemos utilizar la mecánica relativista desarrollada por A. Einstein a finales del siglo XIX y principios del XX [22].

La Mecánica Cuántica describe el comportamiento de partículas subatómicas, en particular de los electrones en átomos, moléculas y sólidos. Esta teoría tiene en cuenta la dualidad onda-partícula de la materia, que se presenta a estas escalas, y por lo tanto el electrón se describe tanto como una partícula (con masa, momentum, etc.), como una onda (con longitud de onda, frecuencia, etc). La Mecánica Cuántica fue desarrollada por L. de Broglie, E. Schrödinger, W. Heisenberg, P. M. Dirac y otros a principios del siglo XX [23].

2.1.1. Electrones y Átomos

El comportamiento de electrones en átomos, moléculas y fases condensadas (líquidos y sólidos) se describe utilizando la mecánica cuántica. El caso más simple involucra el movimiento de un electrón bajo la acción de un potencial V que, en general, es función de la posición. En coordenadas cartesianas (x_1, x_2 y x_3) la descripción del comportamiento del electrón se encuentra utilizando la

ecuación de Schrödinger:

$$\begin{aligned}\hat{H}\Psi &= E\Psi \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x_1, x_2, x_3) \\ \hat{p}_i &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \\ \hat{p}^2 &= -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2} \right) = -\hbar^2 \nabla^2\end{aligned}\tag{2.1}$$

donde m es la masa del electrón, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ la constante de Planck, $\hat{H}$ es el operador Hamiltoniano del sistema, $\hat{p}$ el operador momentum, Ψ es la función de onda del electrón y E las energías (desconocidas) que puede tener el electrón. La función de onda, Ψ , nos permite encontrar diferentes propiedades de la partícula:

- $|\Psi|^2$ es la densidad de probabilidad de encontrar al electrón por unidad de volumen.
- $|\Psi|^2 d^3x$, donde d^3x es un elemento de volumen, nos da la probabilidad de encontrar al electrón en tal elemento de volumen.

Para una discusión más profunda sobre el significado de la función de onda y la naturaleza de la ecuación de Schrödinger referimos al lector a las referencias [23, 24].

Un metal simple, como el sodio, se puede considerar, en una primera aproximación, como una colección de iones Na^+ fijos con un número correspondiente de electrones libres para moverse dentro del cristal pero incapaces de escapar de él. Movimiento libre implica que el potencial V dentro del cristal es constante; como podemos escoger arbitrariamente el punto de referencia del potencial haremos $V = 0$ dentro del cristal. Prohibir que los electrones escapen del cristal implica que $\Psi \rightarrow 0$ cuando nos acercamos a la frontera de este. Por lo tanto estamos interesados en solucionar (2.1) con $V = 0$ y la condición que $\Psi = 0$ en las fronteras.

Desarrollaremos el caso unidimensional para movimiento restringido a $0 \leq x \leq L$ dada su simplicidad, tenemos entonces (de (2.1) y las condiciones de frontera):

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \Psi &= 0 \\ \Psi &= 0 \text{ para } x < 0 \\ \Psi &= 0 \text{ para } x > L\end{aligned}$$

esto significa físicamente que el electrón está restringido a moverse en un pozo de potencial infinito, como el de la figura 2.1. Este caso particular se conoce como el de la partícula en una caja de potencial infinito. Para este problema sólo existen soluciones para valores discretos de E y se conoce como un problema

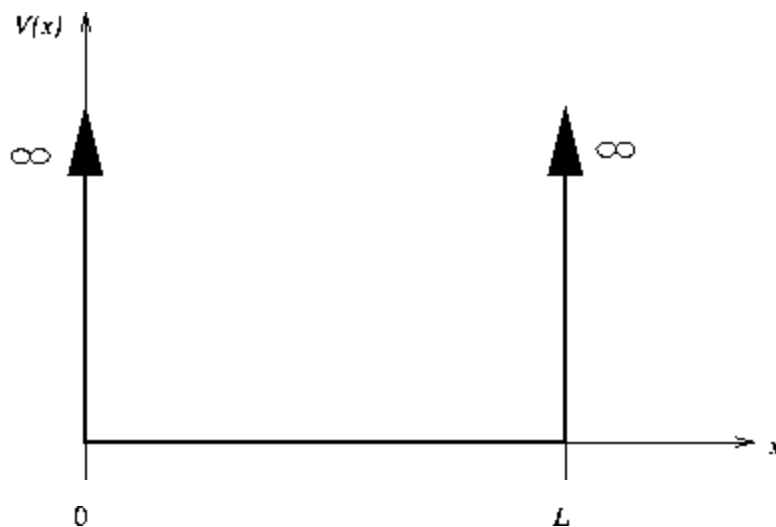


Figura 2.1: Pozo de potencial infinito.

de valores propios. La solución general es

$$\Psi = A \sin(\alpha x) + B \cos(\alpha x)$$

con

$$\alpha = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

A y B constantes. Para satisfacer las condiciones de contorno $B = 0$ y $\sin(\alpha L) = 0$, que se satisface si $E = \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2}$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Esta condición sobre la energía se conoce como la condición de cuantización e implica que el electrón sólo puede existir con ciertos valores discretos de energía. El entero n se llama número cuántico.

Para encontrar el valor de A notamos que el electrón debe estar dentro de la región $[0, L]$ y por lo tanto

$$\int_0^L \Psi^2 dx = 1$$

El caso tridimensional es un poco más elaborado matemáticamente, la condición de cuantización a la que se llega si suponemos que el electrón está confinado en una caja de largo, ancho y alto L_1 , L_2 y L_3 es

$$E = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right)$$

con n_1 , n_2 y n_3 enteros. El caso tridimensional involucra tres números cuánticos. En realidad existe un cuarto número cuántico: el spin del electrón, que puede

$l =$	0	1	2	3	4	5	6	7	8
	s	p	d	f	g	h	i	k	l

Cuadro 2.1: Notación espectroscópica para el número cuántico l

tener uno de dos valores $m_{\pm} = \pm \frac{1}{2}$. El estado del electrón está descrito por cuatro números cuánticos (conocer los n_i y m es equivalente a conocer la energía y la función de onda).

El principio de exclusión de Pauli [23] nos dice que en cualquier átomo, molécula, sólido, etc. no pueden existir dos electrones en el mismo estado cuántico (con los mismos números cuánticos). Por lo tanto cada uno de los electrones que conforman un cuerpo tiene su conjunto específico, y único, de números cuánticos.

Átomo de Hidrógeno

El Hidrógeno es el átomo más simple que se encuentra en la naturaleza (un protón interactuando con un electrón) y su estudio, desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica, nos permite comprender las propiedades y comportamientos de átomos más pesados. Para estudiar el átomo de Hidrogeno proponemos un potencial de Coulomb

$$V = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

donde e es la carga del electrón (y del protón en el núcleo), $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ el radio de la órbita que sigue el electrón alrededor del protón y ϵ_0 es la permisividad del espacio libre.

Al resolver la ecuación de Schrödinger (en coordenadas esféricas), con este potencial y condiciones de frontera adecuadas, la función de onda resultante depende de tres números cuánticos llamados n , l y m_l con $n = 1, 2, 3, \dots$, $l = 0, \dots, n-1$ y $m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l-1, l$.

Las energías permitidas para el electrón resultan ser

$$E_n = -\frac{1}{n^2} E_0$$

con $E_0 = 13,6\text{eV}$. Experimentalmente se ha encontrado que la energía de ionización (energía necesaria para separar un electrón de un átomo de hidrógeno) para este sistema corresponde a $13,60\text{eV}$.

Una notación, comúnmente utilizada, para describir el estado electrónico del átomo de hidrógeno es la notación espectroscópica que reemplaza el valor del número cuántico l por una letra como se indica en el cuadro 2.1. Por lo tanto un electrón que esté en el estado $n = 2$, $l = 0$ se denota como un electrón 2s. El estado base es 1s.

Átomos pesados

Definimos un átomo pesado como el que tiene un núcleo de carga Ze con un sólo electrón, i.e. H , He^+ , Li^{2+} , etc. La ecuación de Schrödinger es equivalente a la del átomo de hidrógeno reemplazando $\frac{e^2}{r}$ por $Z\frac{e^2}{r}$, donde Z es el número de protones en el átomo. Los posibles valores, que se encuentran, de la energía del electrón son

$$E_n = -\frac{Z^2}{n^2}E_0$$

con $E_0 = 13.6\text{eV}$.

La primera aproximación para tratar átomos reales es suponer que todos los electrones se comportan como electrones en átomos pesados (no se tiene en cuenta la interacción entre electrones) y por lo tanto el comportamiento electrónico es el de un electrón interactuando con un átomo pesado. Por principio de exclusión los electrones deben tener energías distintas y por lo tanto los niveles se van "llenando" de acuerdo al número de electrones que tenga el átomo. Por ejemplo el carbono ($Z = 6$) tiene una estructura electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$.

2.1.2. Enlaces atómicos

Las interacciones y enlaces entre átomos son descritos por la Mecánica Cuántica pero el cálculo exacto de estos es posible sólo en un número específico y limitado de casos. Por lo tanto se utilizan modelos para describir los enlaces atómicos. Estos modelos incluyen al enlace iónico, covalente, metálico y secundario (entre uno y dos ordenes de magnitud más débil que los anteriores). En general el tipo de enlace entre átomos es una combinación entre dos o más de estos tipos de enlace.

Enlace iónico

El enlace iónico se presenta cuando dos o más iones interactúan para formar una molécula, el potencial de interacción entre dos átomos de cargas opuestas Q_1 y Q_2 es una combinación entre el potencial de atracción de Coulomb y un potencial de repulsión conocido como el potencial de repulsión de Born

$$V_{12}(r) = \frac{Q_1 Q_2}{r_{12}} + \frac{b}{r_{12}^n} \quad (2.2)$$

donde r_{12} es la distancia de separación de los átomos y $n \approx 10$. El mínimo de la curva $V_{12}(r)$ Vs. r (figura 2.2) representa la separación inter nuclear estable para la molécula que se da gracias al enlace iónico. Este tipo de enlace también permite formar sólidos a partir de pares de iones moleculares alternados regularmente.

Los iones son atraídos electrostáticamente entre ellos y el arreglo tridimensional que forman no colapsa gracias a la repulsión de Born entre ellos; si suponemos que los iones son esferas rígidas podemos asumir que entre cada par de

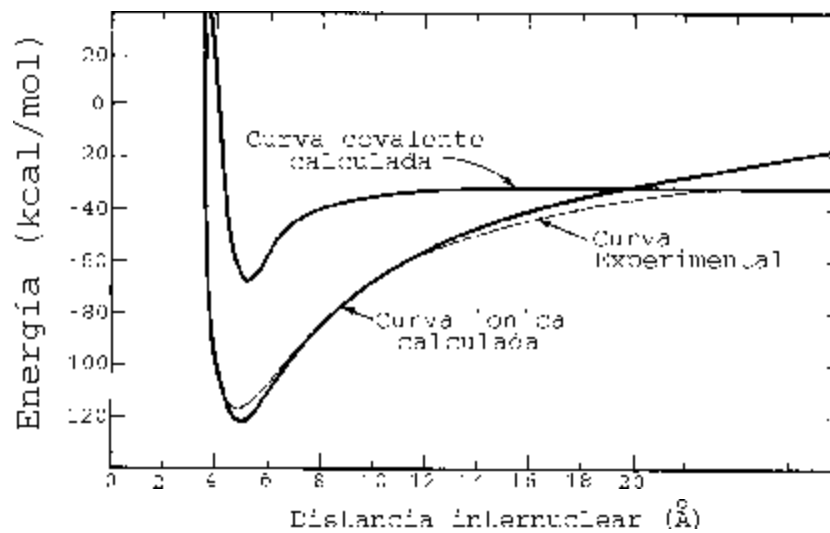


Figura 2.2: Energía potencial para un par de iones en función de la separación inter nuclear. Tomado de [25]

iones (i, j) existe un potencial de la forma

$$V_{ij}(r) = \frac{Q_i Q_j}{r_{ij}} + \frac{b}{r_{ij}^n} \quad (2.3)$$

donde Q_i es la carga de i -ésimo ión, b una constante y r_{ij} la distancia que separa el centro del ión i del j .

Muchas propiedades de los materiales se pueden calcular a partir de este potencial [25].

Enlace covalente

Este tipo de enlace se da cuando dos átomos adyacentes comparten electrones de valencia (electrones de órbitas externas que toman parte en los enlaces). El compartir electrones hace que los átomos se acerquen y formen un enlace entre ellos.

Enlace metálico

Es el enlace que le da las características principales a los elementos llamados metales. Este tipo de enlace permite el desarrollo de estructuras eficientemente formadas que están relacionadas con energías cohesivas altas y una alta movilidad de los electrones (conductividad eléctrica). La mayoría de las estructuras

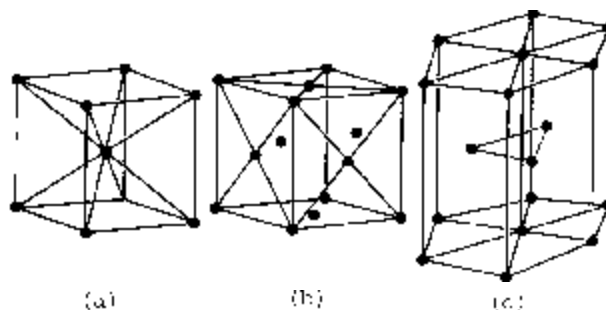


Figura 2.3: Estructuras cristalinas más importantes en metales. (a) bcc. (b) fcc. (c) hcp.

atómicas de los metales se pueden describir en términos de tres estructuras simples (ver figura 2.3):

- fcc (*face centered closest packed*)
- hcp (*hexagonal closest packed*)
- bcc (*body centered cubic*)

Este enlace permite un empaquetamiento cercano de los átomos que forman el cristal y por lo tanto cada átomo tiene un número grande de vecinos cercanos (número de coordinación). Las estructuras hcp y fcc tienen número de coordinación 12 y la bcc 8.

La otra característica de este enlace es la alta conductividad térmica y eléctrica que provee. Esto es consecuencia de la gran cantidad de electrones que se pueden mover casi libremente por todo el material bajo la acción de potenciales eléctricos o gradientes de temperatura externos.

Enlace secundarios

Los enlaces secundarios o fuerzas entre moléculas son responsables de la formación de un grupo grande de sólidos llamados sólidos moleculares. Estas fuerzas fueron descritas, originalmente, por van der Waals para explicar la condensación de gases moleculares a líquidos. La magnitud de estos acoplamientos es relativamente débil y por eso se llaman enlaces secundarios. De hecho estos enlaces se originan debido a distintas interacciones como: interacciones dipolares permanentes, fuerzas dipolares inducidas y fuerzas de dispersión. Aunque sus magnitudes son relativamente débiles, en muchos casos estas interacciones son cruciales a la hora de definir la estabilidad de algunos sólidos. Por ejemplo contribuyen a la condensación de gases nobles, la distancia de equilibrio en los cristales iónicos y a la estabilidad de muchos sólidos (incluyendo proteínas).

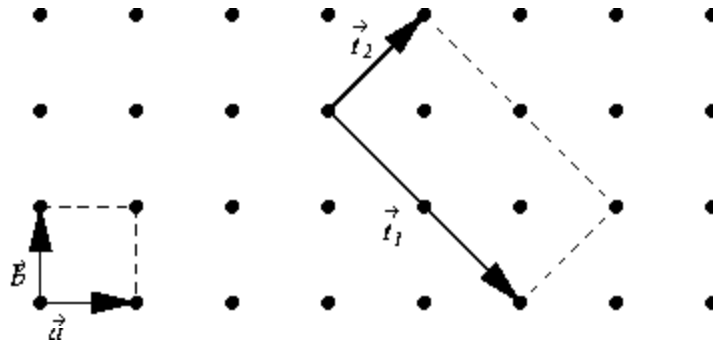


Figura 2.4: Plano de red. Los vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{t}_i$ son traslaciones.

2.1.3. Cristales

Muchos materiales, y los metales en particular, son sólidos cristalinos. En esta sección introducimos los aspectos geométricos de los cristales perfectos: red, celda unidad, base y parámetro de red. Describimos además cuatro tipos de estructuras cristalinas y explicamos las convenciones utilizadas para describir planos y direcciones en cristales: índices de Miller y de dirección.

La característica principal de los sólidos cristalinos es el ordenamiento altamente periódico de los átomos o moléculas que los conforman; estos ordenamientos persisten, en las tres dimensiones, a lo largo de distancias mucho mayores que las distancias entre los constituyentes del cristal. Esta periodicidad afecta la mayoría de las propiedades de los cristales y por lo tanto es importante poder describirla de una forma cuantitativa que recoja efectivamente las relaciones significativas.

Periodicidad y redes

Una red es una colección de puntos en un arreglo periódico. Un plano de red se define por dos traslaciones no colineales y una red espacial por tres traslaciones no coplanares. La línea que une dos puntos, cualquiera, de una red es una traslación, como se indica en la figura 2.4. Las traslaciones son vectores. Para un plano de red cualquier par de vectores traslación con el mismo origen definen una celda unidad. La celda unidad recibe este nombre ya que la red completa se puede generar repitiéndola como unidad básica, utilizando las traslaciones que sirven como bordes de la celda. La celda unidad se considera primaria si todos los puntos de red que la conforman son vértices. En la figura 2.4 la celda formada por $\vec{a}$, $\vec{b}$ es primaria, la formada por $\vec{t}_1$, $\vec{t}_2$ no. El criterio que se utiliza para escoger una celda unidad es que ésta debe representar, de la mejor forma, la simetría de la red.

En el caso tridimensional podemos considerar tres vectores fundamentales de traslación: $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$. Si la posición de uno de los puntos de red está dado por

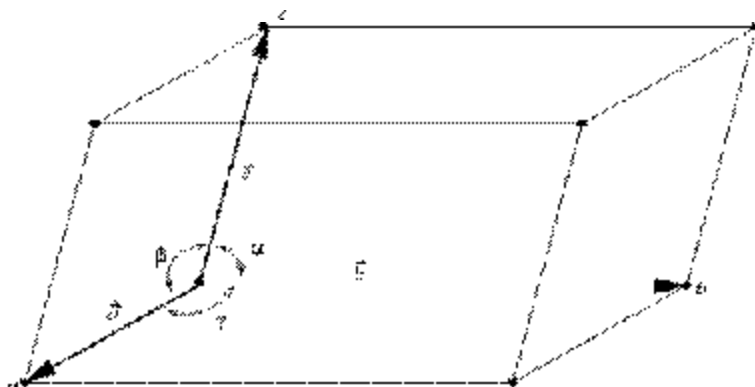


Figura 2.5: Celda unidad.

$\vec{r}$, entonces cualquier otro punto sobre la red se puede escribir como

$$\vec{r} = \vec{r} + \vec{T}$$

con $\vec{T} = n_1\vec{a} + n_2\vec{b} + n_3\vec{c}$ y $n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Si todo punto de la red es trasladado de acuerdo con $\vec{T}$ la estructura es perfecta. En la figura 2.5 se muestra una celda unidad, los vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ se llaman vectores de red y a, b, c, α, β y γ son parámetros de red. Podemos considerar una red como una construcción con celdas unidad.

Una estructura cristalina se forma por la adición de una base a cada punto de la red. Por base se quiere decir un ensamblaje de átomos de una red que tiene la misma composición, orientación y arreglo que los demás átomos de la red.

La simetría de un cristal se define en términos de las operaciones simétricas que transforman el cristal en sí mismo. Cuando algún tipo de operación como rotación lleva a un cuerpo a una superposición exacta con el original se dice que el cuerpo posee este elemento de simetría.

Existen 14 redes distintas en tres dimensiones, conocidas como las redes de Bravais. Las celdas unidad convencionales para estas redes están en la figura 2.6. Las 14 redes están agrupadas en siete sistemas cristalinos como se ve en el cuadro 2.2.

De las 14 estructuras cristalinas sólo tres son de interés para el estudio propuesto: Cúbica cuerpo centrada (bcc), Cúbica cara centrada (fcc) y Hexagonal empaquetamiento-cercano (hcp).

Cristal cúbico cuerpo centrado

La estructura bcc (*body centered-cubic*) se muestra en la figura 2.7. Esta no es una celda unidad primaria ya que hay dos átomos contenidos dentro de esta (el átomo en el centro del cubo y un octavo de cada uno de los ocho átomos de las esquinas). Para describir la posición de un punto sobre la celda, relativa al

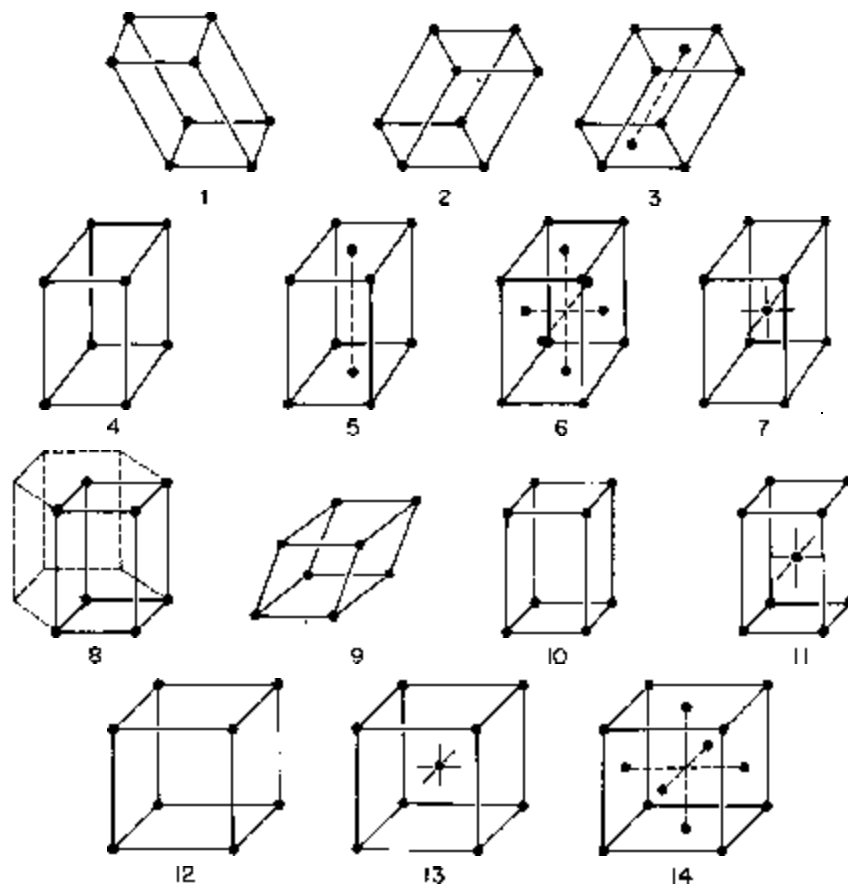


Figura 2.6: Las 14 redes de Bravais. Ver cuadro 2.2 para sus definiciones. Tomado de [25].

# en Fig. 2.6	Nombre de Red	Ejes	Ángulos	Sistema cristalino
1	Triclínica	$a \neq b \neq c$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma$	Triclínico
2	Monoclínica simple	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2}$ $\neq \gamma$	Monoclínico
3	Monoclínica base centrada			
4	Ortorrómbica simple	$a \neq b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma$ $= \frac{\pi}{2}$	Ortorrómbico
5	Ortorrómbica base centrada			
6	Ortorrómbica cara centrada			
7	Ortorrómbica cuerpo centrada			
8	Hexagonal	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \frac{\pi}{2},$ $\gamma = \frac{2\pi}{3}$	Hexagonal
9	Rombohedral	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma$ $\neq \frac{\pi}{2}, < \frac{2\pi}{3}$	Trigonal
10	Tetragonal simple	$a = b \neq c$	$\alpha = \beta = \gamma$ $= \frac{\pi}{2}$	Tetragonal
11	Tetragonal cuerpo centrada			
12	Cúbica simple	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma$ $= \frac{\pi}{2}$	Cúbico
13	Cúbica cuerpo centrada			
14	Cúbica cara centrada			

Cuadro 2.2: Características de las redes de Bravais

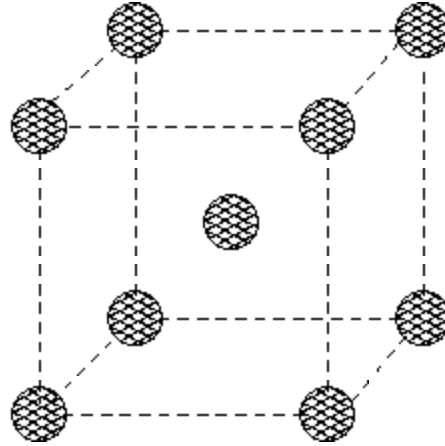


Figura 2.7: Celda unidad para una estructura bcc.

origen de ésta, se utilizan coordenadas de red. La posición se mide en unidades de a en la dirección de $\vec{a}$, unidades de b en la dirección de $\vec{b}$ y unidades de c en la dirección de $\vec{c}$. Por lo tanto la posición del átomo central es $\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2}$. El hierro tiene esta estructura a temperatura ambiente.

Cristal cúbico cara centrada

La celda unidad de la estructura fcc (*face centered-cubic*) está compuesta por una celda cúbica con un átomo en el centro de cada una de las seis caras. Esta celda contiene cuatro átomos (un octavo de cada ocho átomos en los vértices mas medio átomo en cada una de las seis caras). Los átomos están situados en las coordenadas:

$$000, 100, 010, 001, 110, 101, 011, 111, \frac{1}{2}\frac{1}{2}0, \frac{1}{2}0\frac{1}{2}, 1\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}1\frac{1}{2}, 0\frac{1}{2}\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\frac{1}{2}1$$

Cristal hexagonal con empaquetamiento cercano

La celda unidad hcp (*hexagonal closet-packed*) está formada a partir de la red hexagonal simple (figura 2.6#8) con una base de dos átomos, 000 y $\frac{2}{3}\frac{1}{3}\frac{1}{2}$. Esta estructura está ilustrada en la figura 2.8.

2.1.4. Direcciones cristalográficas y planos

Una dirección cristalográfica en un cristal está determinada por el vector $u\vec{a} + v\vec{b} + w\vec{c}$, donde u , v y w son números enteros. Dado que los vectores $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ ya han sido determinados en la escogencia de la celda unidad solamente es necesario especificar la tripleta de números ordenados $[uvw]$. Por ejemplo, si la celda es cúbica simple y la dirección va del origen por la diagonal hacia valores

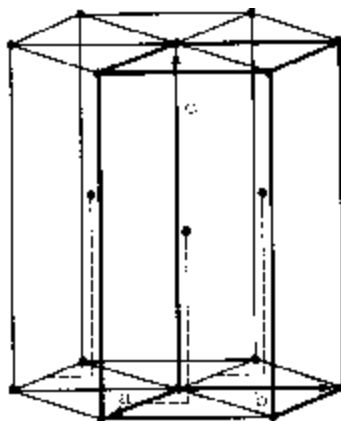


Figura 2.8: Estructura hcp.

positivos de $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ podemos especificar esta dirección con $[111]$. Toda línea paralela a ésta también tiene dirección $[111]$.

Para especificar una dirección negativa se utiliza una barra encima del número correspondiente, ejemplo: $[1\bar{1}\bar{2}]$. La notación $\langle 111 \rangle$ indica todas las direcciones que van del origen a lo largo de una de las diagonales de la celda.

$$\langle 111 \rangle = \{[111], [\bar{1}11], [1\bar{1}1], [11\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}1\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1]\}$$

Un plano que pasa por un punto de red se llama plano cristalográfico. Cada plano de estos tiene un número infinito de planos que son paralelos a él, por simplicidad se utilizan tres enteros (hkl) , llamados índices de Miller, para definir la orientación de un plano de estos. La forma para encontrar los índices de Miller para un plano cualquiera es la siguiente (ver figura 2.9):

1. Determinar los interceptos del plano en los tres ejes del cristal en unidades de a , b y c .
2. Tomar los recíprocos de tales números.
3. Remover fracciones.

Los interceptos en el caso de la figura 2.9 son 2, 3 y 1 para $\vec{a}$, $\vec{b}$ y $\vec{c}$ respectivamente. Sus recíprocos son $\frac{1}{2}$, $\frac{1}{3}$ y 1. Si eliminamos las fracciones obtenemos los índices de Miller: (326) . Un conjunto de índices de Miller (hkl) no especifica solamente un plano, sino todos los planos paralelos a él.

Si un plano tiene un intercepto negativo se utiliza, también, la convención de la barra encima de la dirección negativa. La notación $\{hkl\}$ indica todos los planos equivalentes en un cristal. Por ejemplo: $\{100\}$ está dándonos, para un cristal cúbico, todas las caras del cubo. Los índices de Miller de algunos planos importantes en estructuras cúbicas se muestran en la figura 2.10.

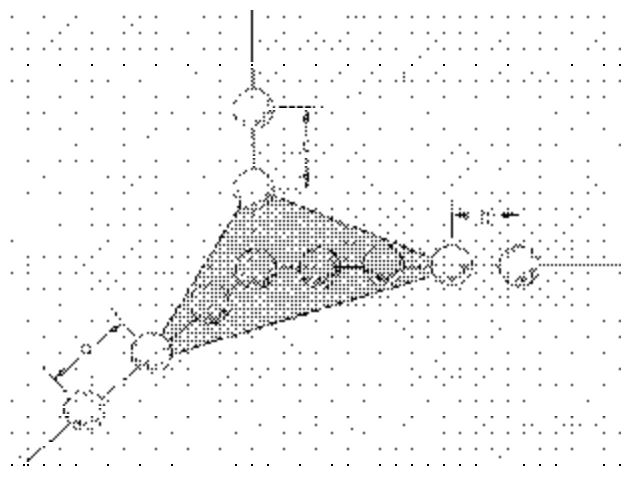


Figura 2.9: Interceptos entre el plano de átomos y los tres ejes de la celda. sólo se muestran unos pocos átomos. Tomado de [25].

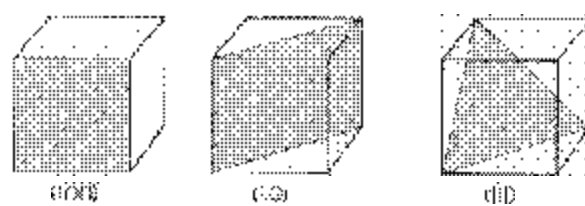


Figura 2.10: Planos importantes de un cristal cúbico y sus índices de Miller. Tomado de [25].

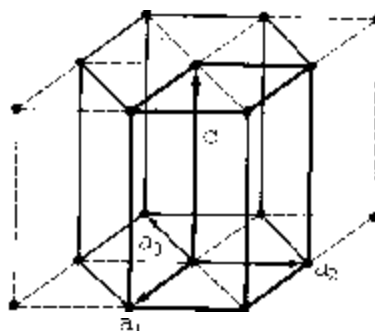


Figura 2.11: Sistema hexagonal.

En cristales hexagonales podemos escoger una celda unidad definida por las líneas gruesas de la figura 2.11, pero en general es más cómodo utilizar la celda definida por los vectores $\vec{a}_1$, $\vec{a}_2$, $\vec{a}_3$ y $\vec{c}$. Note que en este caso tres de los ejes del cristal están en la base de un hexágono (plano basal). Los interceptos de un plano cristalográfico con estos cuatro ejes lleva a cuatro índices, $(hki\ell)$, llamados de Miller-Bravais. Si los índices de Miller son (hkl) para algún plano, entonces los índices de Miller-Bravais para estos planos son $(hki\ell)$, con $i = -(h + k)$.

2.1.5. Empaquetamiento en cristales

Como hemos visto los átomos se pueden aproximar como esferas sólidas y podemos considerar que los cristales están formados por tales cuerpos. Una de las formas más importantes de empaquetamiento involucra una estructura de empaquetamiento cercano de capas de esferas; algunas estructuras cristalinas importantes como la fcc y la hcp se pueden construir al apilar tales capas en una secuencia específica de apilamiento. Otro concepto importante que definimos en esta sección es el de vacío (espacio entre esferas rígidas). Estos vacíos pueden ser ocupados por átomos pequeños y por lo tanto se pueden diluir impurezas intersticialmente en sólidos cristalinos. También discutimos otros tipos de soluciones sólidas como las sustitucionales. El empaquetamiento es consecuencia de las restricciones que se deben imponer sobre la red cristalina dependiendo del material que se esté teniendo en cuenta. Por ejemplo en los sólidos iónicos es importante mantener la neutralidad eléctrica en cada celda unidad y minimizar la repulsión ión-ión; la naturaleza altamente direccional del enlace covalente también es una condición importante. Curiosamente ninguno de estos fenómenos es relevante en los metales pero es en estos donde el concepto de empaquetamiento da mejores resultados.

El empaquetamiento cercano es la forma de ordenar esferas (átomos) de forma tal que el espacio disponible se llene de la forma más eficiente, esto se logra cuando cada esfera está en contacto con un número máximo de esferas. En una capa de empaquetamiento cercano cada esfera está en contacto con otras

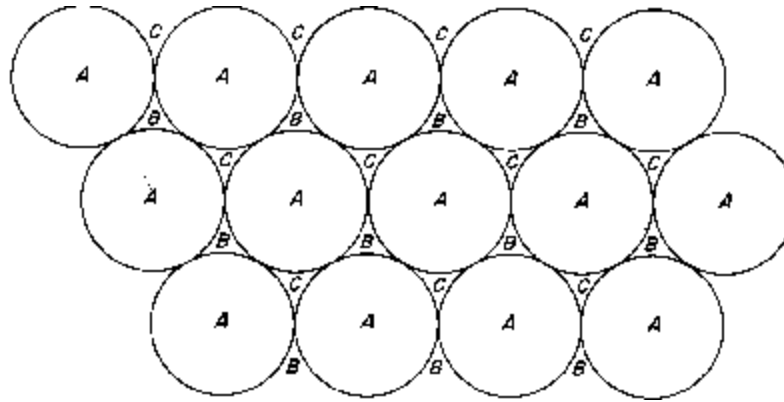


Figura 2.12: Esquema de empaquetamiento cercano de un sólido. En la figura se muestra la capa A.

seis (vecinos cercanos) y en un sólido se tienen 12 de estos vecinos.

La figura 2.12 ilustra cómo se apilan las capas: consideremos la capa de esferas A fijas de la figura, la segunda capa empaquetada cercanamente reposa encima de esta (puede ser la capa B o la C, supongamos B), los átomos de la capa B están puestos sobre los valles que forman la capa A; encima de la capa B puede haber una capa C u otra capa A. Cuando se encuentra un patrón de apilamiento se le denomina secuencia de apilamiento.

Para el caso de una estructura hcp se tiene una secuencia de dos capas AB como se muestra en la figura 2.13(a), la secuencia ABC de la misma gráfica corresponde a la estructura cristalina fcc. El plano más cercanamente empaquetado para la estructura hcp es el plano basal (el (0001)); para la fcc tenemos cualquiera de los planos octaédricos {111}.

Vacíos

Aunque existe la posibilidad de tener una gran variedad de empaquetamientos cercanos la mayoría de las estructuras elementales que cumplen empaquetamiento cercano en la naturaleza son fcc o hcp. Existen dos tipos de vacíos que ocurren en estructuras con empaquetamiento cercano: si el vacío está rodeado por cuatro esferas se le conoce como un vacío tetraédrico, si está rodeado por seis esferas tenemos un vacío octaédrico. Los dos tipos de vacíos se pueden observar en la figura 2.14.

El número de esferas que rodean al vacío se llama número de coordinación del vacío y el espacio ocupado por porciones de esfera que tocan el vacío se llama poliedro de coordinación. También es importante saber la posición de los vacíos con respecto a la celda convencional. En el caso de una celda cúbica fcc (vacío tetraédrico) el vacío está localizado en $\frac{1}{4}\frac{1}{4}\frac{1}{4}$ (centro de la subcelda cúbica), dado que hay ocho subceldas por celda hay ocho vacíos tetraédricos por celda o dos

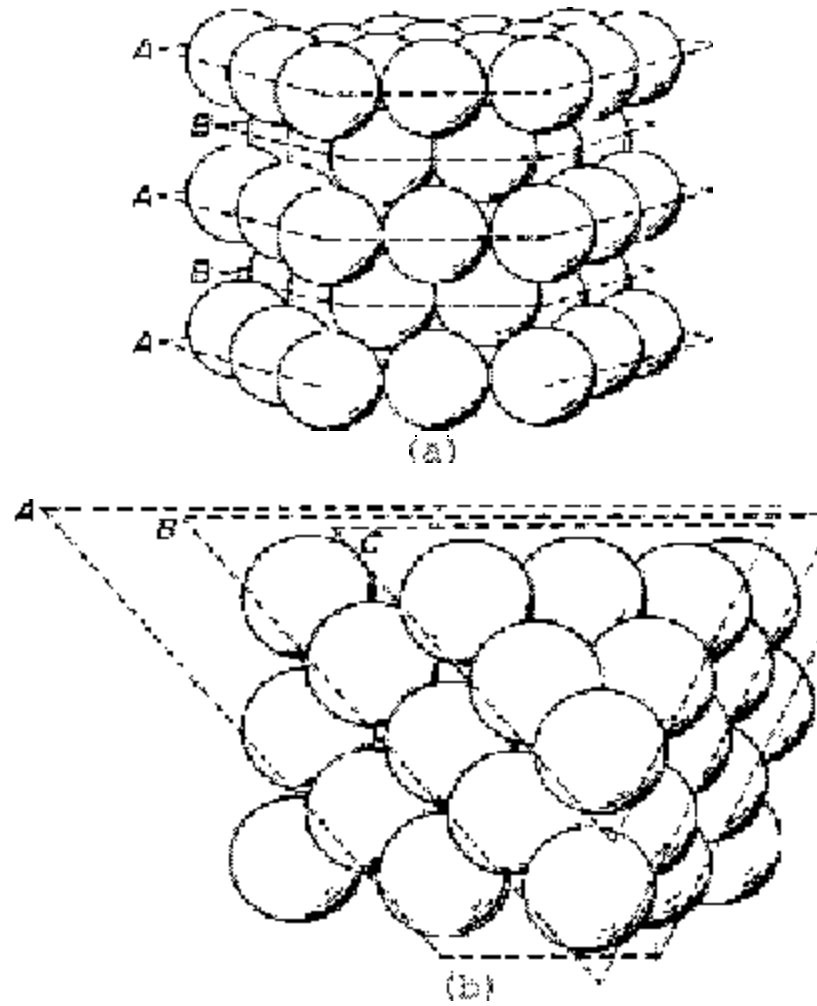


Figura 2.13: Sólidos (a) hcp y (b) fcc con su estructura de empaquetamiento cercano. Tomado de [25].

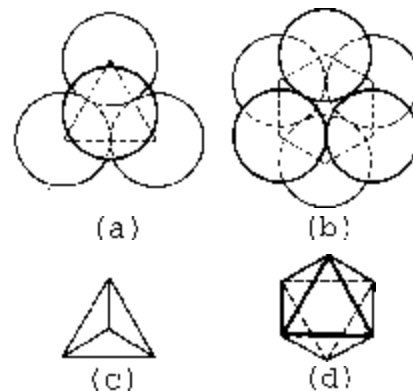


Figura 2.14: Vacíos que se presentan en empaquetamiento cercano. (a) y (c) Vacío tetraédrico, (b) y (d) vacío octaédrico.

por átomo.

El orden de la secuencia de apilamiento no cambia la razón de vacíos por átomo. Una propiedad importante es la razón de radios, definida como la razón entre el radio r de la esfera que cabe en el vacío y los radios R de las esferas que forman la estructura; esta razón es importante ya que varias estructuras pueden acomodar átomos pequeños en sus vacíos. Por ejemplo, el hierro es un cristal fcc a altas temperaturas y puede disolver apreciables cantidades porcentuales de carbono en sus vacíos.

Estructuras de aleaciones simples

Las aleaciones son mezclas de dos o más materiales, en particular metales. La consecuencia principal de formar una aleación es que el nuevo material presenta novedosas propiedades, estas nuevas características están íntimamente relacionadas con la estructura cristalina de la aleación.

Los átomos metálicos pueden reemplazarse los unos a los otros en cristales de diversas formas. Cuando átomos de un tipo reemplazan a átomos de otro tipo de tamaño similar en posiciones equivalentes de la red el resultado es llamado una solución sólida sustitucional. Existen gran cantidad de pares de metales que pueden formar soluciones sólidas binarias de esta forma.

Otro tipo posible de solución es la intersticial que se da cuando los átomos del elemento que se diluye en una red se distribuyen en los vacíos generados por el empaquetamiento de los átomos solventes. Un ejemplo importante, que se tratará en la sección 2.2, de este tipo de aleación es la que se da entre el hierro y el carbono.

2.1.6. Imperfecciones cristalinas

Los cristales nunca son perfectos (de la forma como se han descrito en la sección 2.1.3), siempre existen defectos en el empaquetamiento. Estos defectos se pueden describir geométricamente como imperfecciones puntuales, de línea, planares y espaciales. De todos los tipos de defectos discutiremos extensamente la dislocación, o imperfección de línea, ya que ésta está involucrada en todo proceso de deformación plástica de sólidos cristalinos. Sin dislocaciones los metales serían muy fuertes pero no se podrían moldear.

Buena parte de las propiedades de los cristales reales (en particular propiedades de cohesión y coeficientes elásticos) se pueden justificar o modelar a partir de las ideas expuestas en secciones anteriores sobre cristales perfectos. Sin embargo existen otras propiedades que no se ajustan a tales predicciones, esto indica que los cristales reales difieren en alguna manera importante de los cristales ideales. Estas diferencias se le atribuyen a las imperfecciones que se originan en las desviaciones que se dan en las estructuras reales de las idealizadas. Aunque la palabra imperfección nos hace pensar en resultados no deseados es importante anotar que éstas pueden ser responsables de la mejora de ciertas propiedades de algún metal en particular.

Defectos puntuales

Los defectos puntuales se clasifican dependiendo de si la estructura cristalina del sólido es iónica o no. Haremos una descripción del caso no iónico.

El defecto puntual más común se da cuando un número significativo de posiciones de la red cristalina están vacantes, estos defectos se conocen como faltantes y requieren de una cantidad de energía mínima para darse, esta energía es característica individual de cada sólido pero se puede encontrar utilizando principios termodinámicos o de mecánica estadística. Otro tipo de defectos es el defecto intersticial que se da cuando un átomo de la red no está en su posición esperada sino metido entre otros dos. La energía de formación es considerablemente más grande que la de un faltante. Un defecto de Frenkel es, básicamente, una combinación de los dos defectos anteriores: se remueve un átomo de su sitio en la red y se coloca en un sitio intersticial. Un cuarto tipo de defecto se encuentra en sólidos metálicos, iónicos o covalentes cuando en la red hay un átomo que no corresponde al cristal puro; este átomo se conoce como una impureza. Las impurezas pueden distorsionar la red apreciablemente aun a varios átomos de distancia de la vacancia donde se encuentra.

Una de las propiedades más importantes de los iones intersticiales y las vacancias es que pueden migrar por el cristal con facilidad si se les asiste con alguna fluctuación térmica, este fenómeno se conoce como difusión de materia en sólidos.

Defectos de línea

Las dislocaciones son defectos de línea en cristales. Hay dos tipos de dislocaciones: de borde y de tornillo.

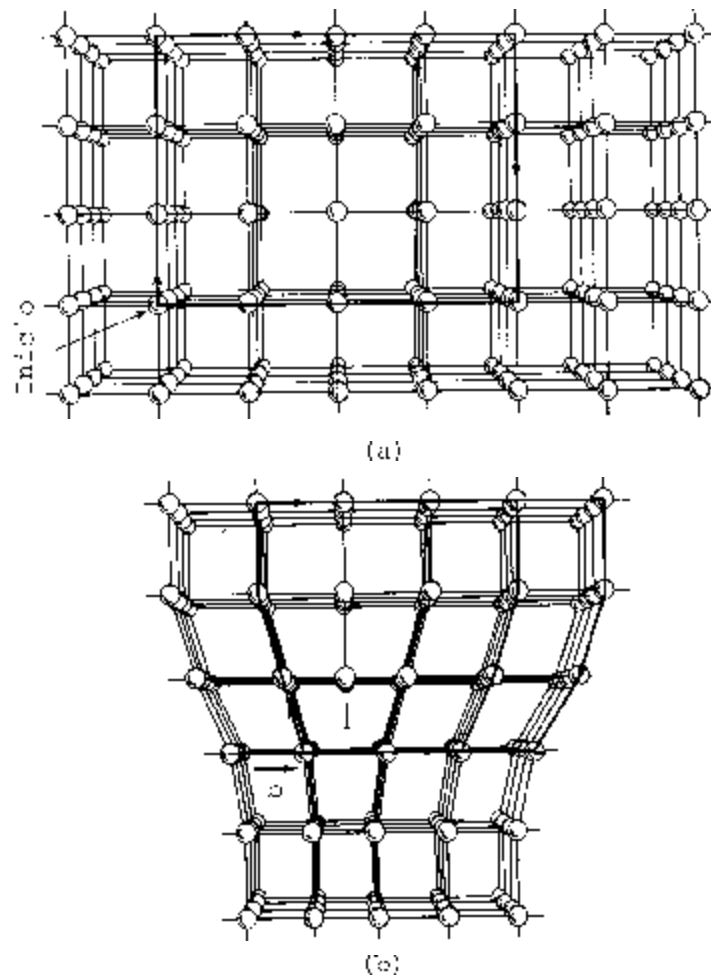


Figura 2.15: Descripción de una dislocación de borde en términos del vector de Burges. (a) Un vector de Burges en un material libre de dislocaciones. (b) El mismo vector de Burges pasando por una dislocación de unidad de vector de Burges b .

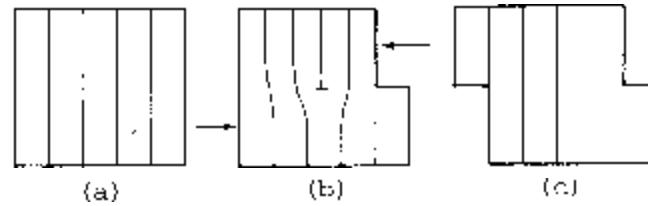


Figura 2.16: (a) Cristal perfecto. (b) Cristal con dislocación; la parte superior del cristal tiene un plano extra de átomos por encima de la línea de dislocación. (c) La dislocación se ha desplazado hacia la izquierda fuera del cristal, el resultado es un cristal permanentemente deformado.

La figura 2.15 muestra un ejemplo de dislocación de borde para el caso de un cristal cúbico simple. El símbolo $\perp$ indica la línea de dislocación. Cerca de la dislocación el arreglo atómico se ve afectado pero lejos de ésta la estructura cristalina vuelve a ser normal, aunque los átomos se desplazan un poco de su posición original. Una línea de dislocación se describe por su dirección (vector unitario paralelo a esta) y su vector de Burges, $\vec{b}$, que se define como el vector faltante para poder completar un circuito cerrado en una estructura cristalina (ver figura 2.15); si $\vec{b}$ es perpendicular a la línea de dislocación tenemos una dislocación de borde. Las dislocaciones se pueden entender como un plano extra de átomos que se inserta en la red.

Una propiedad importante de las dislocaciones es que éstas se pueden desplazar bajo la acción de esfuerzos aplicados. El movimiento de las dislocaciones es un fenómeno importante ya que es el mecanismo por el cual ocurre la deformación plástica de un material. Este fenómeno se puede ver ilustrado en la figura 2.16. La creación de dislocaciones por desplazamiento (figura 2.16(b)) requiere más energía que el desplazamiento de éstas una vez se han formado. Cuando los metales se deforman plásticamente las dislocaciones tienden a multiplicarse.

Otro tipo de dislocaciones que juegan un papel importante en la deformación plástica y el crecimiento de cristales ordinarios son las dislocaciones de tornillo que se caracterizan por tener un vector de Burges paralelo a la línea de dislocación. Un ejemplo se puede apreciar en la figura 2.17 en la que la línea $\vec{SO}$ es paralela a la línea de dislocación. Los planos del cristal perpendiculares a la línea de dislocación forman una rampa en espiral. La dislocación de tornillo es tan importante en la deformación plástica de los metales como la de borde.

Defectos planares

Las superficies son las fronteras que se forman cuando el cristal se origina; la estructura y movilidad de estas fronteras influyen profundamente en varias propiedades del cristal. La superficie externa del cristal es un defecto importante tanto en composición como en estructura, de igual manera existe un número apreciable de defectos planares asociados con el interior del cristal como fron-

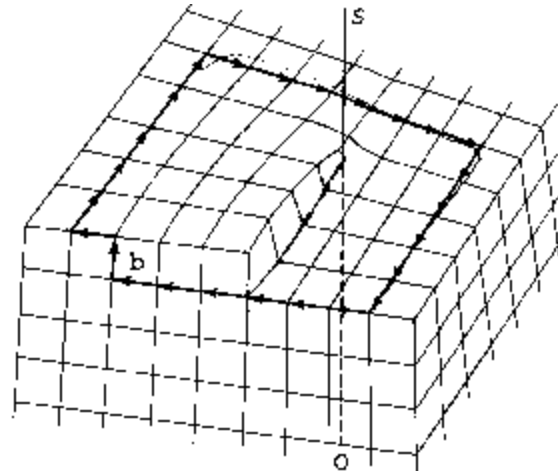


Figura 2.17: Vector de Burgers para una dislocación de tornillo en una red cúbica simple.

teras de grano y fallas en el apilamiento. Los cinco tipos de defectos planares más importantes están enunciados en el cuadro 2.3 junto con la característica que acompaña los cristales adyacentes (cristalografía).

2.2. Aleaciones hierro-carbono (Fe-C)

Las aleaciones de hierro son las más utilizadas actualmente en la industria, las más comunes son las de hierro y carbono también conocidas como aceros. Existen varias razones por las cuales es interesante estudiar sistemas de este tipo:

Tipo de defecto planar	Cristalografía
Frontera gemela coherente	Diferencia en orientación con restricciones en simetría
Falla en apilamiento	Diferencia en secuencia de apilamiento de capas cristalinas
Frontera de grano con ángulo pequeño	Pequeña diferencia de orientación entre dos cristales de la misma fase
Frontera de grano	Desorientación significativa entre dos cristales de igual fase
Superficie externa	Superficie expuesta a presión en equilibrio

Cuadro 2.3: Imperfecciones planares.

1. Los aceros son el grupo de aleaciones más importante usado por la humanidad desde hace 4000 años.
2. Dado que el hierro es un elemento muy abundante en la corteza terrestre (4,2 % en peso) los hierros y los aceros constituyen la gran mayoría de las aleaciones que se utilizan.
3. Las formas alotrópicas del hierro permiten la formación de una gran variedad de microestructuras, lo que permite obtener muchas propiedades físicas diferentes.
4. Aun después de 4000 años de acumulación de conocimientos empíricos sobre estas estructuras no se tienen suficientes elementos para obtener un entendimiento básico de su comportamiento. De hecho éste es el sistema de aleación más estudiado y el que presenta una mayor cantidad de problemas sin resolver, en muchos casos toca conformarse con descripciones cualitativas de la estructura y de sus propiedades físicas.
5. Los cambios de estado sólido que ocurren en los aceros son similares a los que ocurren en otros sistemas de aleación. El estudio de las transformaciones de fase del acero permite explicar las de otros metales y aun las de los sólidos en general.

En este trabajo nos limitaremos a tratar cambios en la estructura de aceros a temperatura constante. El cambio de temperatura en una aleación de cualquier tipo es de suma importancia y su estudio permite entender los cambios estructurales que sufre ésta al intercambiar calor con el medio. Para un tratamiento detallado sobre el efecto que tiene el cambio de temperatura en diferentes materiales ver [26].

Estados alotrópicos del hierro

El átomo de hierro está situado hacia el extremo de la primera serie de transición de la tabla periódica. Su configuración electrónica es $\text{Ar}3d^64s^2$; los elementos vecinos con número atómico mayor (Co, Ni, Cu) cristalizan con estructuras compactas fcc o hcp. Los elementos con número atómico menor (Ti, V, Cr, Mn) cristalizan con estructura bcc. El hierro tiene la posibilidad de cristalizar con cualquiera de estas dos estructuras: fcc o bcc.

Hoy en día se admite que el hierro presenta, en estado sólido, cuatro estados alotrópicos identificados con las cuatro primeras letras del alfabeto griego. Entre 1538 y 1394 °C cristaliza con estructura bcc (fase δ); entre 1394 y 912 °C con fcc (fase γ también conocida como austenita); entre 912 y 770 °C con estructura bcc (fase β); y por debajo de 770 °C con bcc (fase α o ferrita). La fase β en realidad no es un estado alotrópico sino una fase de transición [26] y en varios textos se trata también como fase α . Estos cambios de estado alotrópicos son reversibles. En este trabajo trabajaremos a temperatura ambiente y por lo tanto partiremos de la base que la estructura de celda básica es bcc.

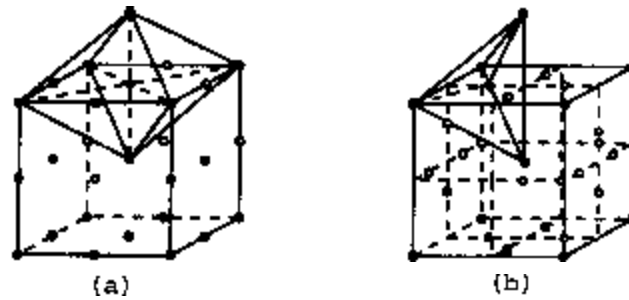


Figura 2.18: Intersticios en la estructura bcc del hierro. (a). Intersticio tetraédrico; (b). intersticio octaédrico. Tomado de [26]

Debido a los grandes vacíos que presenta la fase fcc γ -Fe es el único polimorfo del hierro que puede disolver grandes cantidades de carbono. Por debajo de los 723 °C (temperatura eutéctica) puede existir el compuesto Fe_3C llamado cementita cuya estructura no está relacionada de una forma simple con las estructuras γ -Fe y α -Fe.

2.2.1. Aleaciones de hierro

La adición de carbono al hierro es suficiente para formar acero, pero este término es genérico y cubre un intervalo enorme de composiciones complejas; en realidad los aceros son aleaciones de hierro-carbono y otros elementos. Hay tres grupos principales de elementos aleantes: los que forman soluciones sólidas intersticiales, los que las forman sustitucionales y los que son inmiscibles en las redes cristalinas del hierro.

Aleaciones intersticiales

La figura 2.18 muestra los intersticios en la estructura cristalina bcc. Las cavidades más grandes de esta son los huecos tetraedrales que existen entre dos átomos de la arista y dos átomos centrales, los cuales forman un tetraedro (figura 2.18(a)); los intersticios que siguen en tamaño son los octaedros de las caras y las aristas $\langle 001 \rangle$, cuyos átomos vecinos están en los vértices de un octaedro aplastado (figura 2.18(b)).

Los elementos intersticiales en el hierro son: H, C, N y O.

Aleaciones sustitucionales

Varios elementos son parcial o completamente solubles como elementos sustitucionales de la red del hierro, en general los elementos son solubles en los límites del grano y su grado de solubilidad depende de la temperatura del material. Algunos de los elementos sustitucionales son: Be, Al, Si, Pb, Ti, V, Cr,

Mn, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As; entre otros.

En general en los aceros siempre hay elementos sustitucionales y por lo tanto los intersticios interactúan con los sustitucionales, esto se refleja en la formación de carburos, nitruros y carbonitruros.

Todos los elementos que forman solución sólida con el hierro afectan la dureza de la ferrita, pero el efecto de aleantes en la ferrita del acero es diferente a causa de la presencia de carburos y también porque algo de los elementos de la aleación reacciona con otros constituyentes del acero.

2.2.2. Transformación Martensítica

La mayoría de las transformaciones de fase en el estado sólido empiezan con la formación de núcleos de la fase nueva y el crecimiento de estos depende del movimiento atómico (activado térmicamente). En las reacciones típicas de esta clase, una o varias fases nuevas crecen, a expensas de las preexistentes, mediante la migración relativamente lenta (dependiente de la temperatura) de la frontera interfacial. Los cambios de esta clase se conocen como transformaciones de nucleación interatómicas y son activadas térmicamente.

Las transformaciones martensíticas sólo se dan en estado sólido y se caracterizan por que la velocidad de crecimiento es mucho mayor que la de nucleación y por ello tienen una dinámica muy diferente. Estas transformaciones dependen de los arreglos regulares de los átomos en los cristales y de la posibilidad de cambiar de un ordenamiento a otro por movimientos atómicos coordinados. Vale la pena hacer notar que no hay una definición inequívoca de reacción martensítica.

Maclado y transformación martensítica

Cuando se aplica un esfuerzo a un cristal, este se puede deformar heterogéneamente por deslizamientos sobre unos pocos planos o se puede deformar de modo homogéneo por cizallamiento mediante la formación de maclas. El maclaje reproduce la estructura cristalina inicial pero cambia su orientación. En términos de defectos planares la acción del maclaje es introducir una frontera de grano en el material. Una transformación martensítica confiere al cristal una estructura cristalográfica distinta. Hay grandes similitudes entre los dos tipos de transformación, pero también diferencias importantes.

Las características del maclado son [26]:

1. La cizalladura se puede visualizar como el producto del movimiento de una dislocación parcial con vector de Burgers $(1/6) [11\bar{2}]$ en cada uno de los planos sucesivo (111) .
2. El cizallamiento sólo incluye dislocaciones parciales y es relativamente grande, la estructura cristalina es la misma antes y después del maclado. Esto se denomina cizallamiento invariante de red.
3. La deformación por maclado cambia fuertemente la forma de la región cizallada.

4. El plano invariante que separa la región maclada de la matriz es el plano habitual y tiene estructura atómica no distorsionada. En general la distancia interatómica y los ángulos entre las direcciones cristalográficas en el plano habitual no cambian con la transformación.
5. La matriz que rodea la macla debe deformarse por deslizamiento para mantener la continuidad entre la macla y el resto del grano, lo que implica que el trabajo necesario para deformar la macla incluye la energía necesaria para deformar la región maclada y la matriz adyacente.
6. El origen de este trabajo se debe a esfuerzos aplicados externamente.

Las características, más o menos generales, de las reacciones martensíticas observadas son [26]:

1. La transformación ocurre por cizallamiento de volúmenes discretos de material. Se observa muy a menudo que la fase martensítica aparece con una morfología de placas definida y distinta dentro de la matriz.
2. La transformación martensítica ocurre sin difusión en el sentido que no se requiere activación térmica; es decir la distancia entre los átomos no cambia significativamente durante la transformación. El movimiento relativo de los átomos es muy pequeño y por lo tanto los vecinos cercanos continúan siéndolo y el orden de corto alcance de la matriz se conserva.
3. Las reacciones martensíticas pueden ocurrir con velocidades muy elevadas (del orden de la velocidad del sonido). Por otra parte la interfaz martensita-austenita es altamente deslizante y está constituida por un arreglo de dislocaciones. La transición puede ser ayudada o inhibida por tensiones y deformaciones aplicadas.

2.3. Propiedades Mecánicas de los Metales

Los metales se utilizan en ingeniería por gran cantidad de razones pero generalmente son utilizados como elementos de estructuras. En esta sección haremos una breve descripción de las propiedades mecánicas de los metales en general. El objetivo es entender el comportamiento de estos en diferentes regímenes de carga. Esta descripción del material se obtiene haciendo un test tensil donde se monitorea constantemente la carga necesaria para obtener cierta deformación en el material mientras que se carga el material con una tensión específica a una rata constante. El objeto al que se le aplica la tensión es, generalmente, una probeta del material que se desea estudiar. El resultado inmediato de tal estudio es una curva carga Vs. elongación. Para obtener una descripción más general de las características del material se normaliza los datos de esta curva para la geometría específica de la probeta. El resultado de esta operación es la conocida curva esfuerzo-deformación (ver Fig. 2.19 y 2.21). En este tipo de

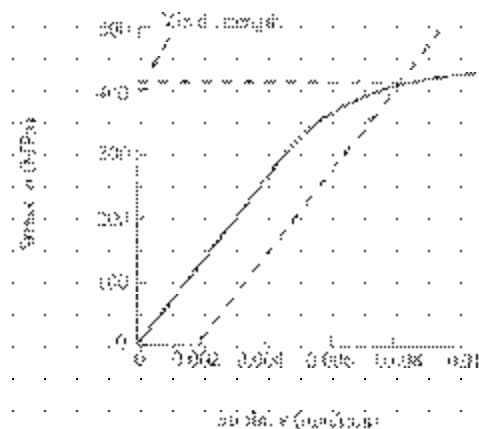


Figura 2.19: Curva esfuerzo deformación típica para un metal. Tomado de [27].

gráficas el estrés, σ (eje vertical), está definido como

$$\sigma = \frac{P}{A_0}, \quad (2.4)$$

donde P es la carga en la muestra y A_0 la sección de área transversal original (medida sin carga en la mitad de la probeta). Las probetas de prueba son diseñadas de forma que la sección transversal, en el centro de esta, es uniforme y un poco más delgada que en los extremos donde hay contacto con la máquina universal. Esta región delgada, denominada la región de calibre (*gage length*), experimenta la mayor concentración de carga lo que localiza cualquier deformación significativa. La deformación unitaria, ϵ (eje horizontal en las gráficas esfuerzo-deformación), está definida como

$$\epsilon = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0} \quad (2.5)$$

con l la longitud de la región de calibre a una carga determinada y l_0 cuando no hay carga actuando sobre la muestra.

De este tipo de pruebas se pueden obtener cinco propiedades básicas de metales (ver Fig. 2.20 para las correspondencias numéricas):

1. **Módulo de elasticidad:** pendiente de la curva en la región elástica (lineal), en esta región el material se comporta de forma equivalente a un oscilador que obedezca la ley de Hook [27]. Representa la rigidez del metal.
2. **Resistencia a cedencia:** es el corte de la gráfica con una línea recta paralela a la de la región elástica con un corrimiento del 0.2 % en el eje de la deformación. Esta cantidad representa el esfuerzo necesario para provocar una deformación permanente del 0.2 %.

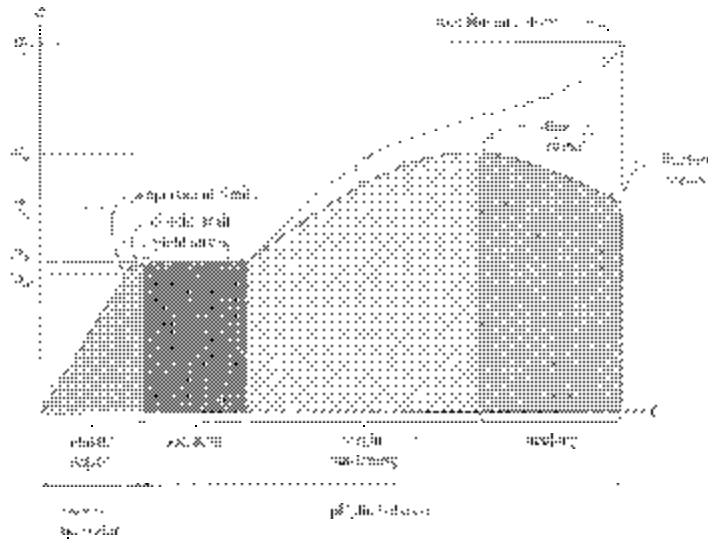


Figura 2.20: Propiedades mecánicas claves encontradas con una curva esfuerzo Vs. deformación (no está a escala). Tomado de [28].

3. **Resistencia tensil:** el esfuerzo máximo que soporta la muestra, es el punto máximo de la curva.
4. **Ductilidad:** cantidad frecuentemente cuantificada como el porcentaje de elongación en el punto de fractura ($\epsilon_{fractura} \times 100$). Es una indicación general de la capacidad del material para deformarse plásticamente.
5. **Resistencia:** describe la combinación de dos propiedades: ductilidad y carga máxima que soporta. Está definido como el área bajo toda la curva esfuerzo Vs. deformación.

Entre la región de la resistencia a la cedencia y la resistencia tensil la deformación plástica está generando dislocaciones en el material. El aumento en la densidad de las dislocaciones dificulta aumentar la deformación plástica de éste. Este fenómeno se conoce como endurecimiento por deformación.

Puede parecer, por la gráfica, que al superar la resistencia tensil el efecto de continuar la deformación plástica sea ablandar el material dado que el valor del estrés empieza a reducirse. Realmente esta caída en el valor del estrés se debe al hecho de que esta cantidad y la deformación están definidas relativas a las dimensiones originales de la muestra. Cuando el material llega al punto de resistencia tensil experimenta un “encuellamiento” (*necking*) en la zona de calibre.

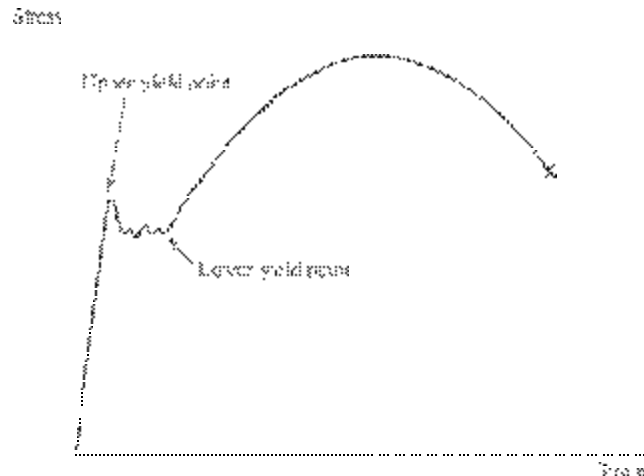


Figura 2.21: Curva esfuerzo deformación típica de aceros con bajo contenido de carbono. Tomado de [27].

2.3.1. Aspectos del Flujo Plástico Continuo, Encuellamiento

Al final de la curva esfuerzo deformación de la figura 2.20 se observa un evento llamado “encuellamiento”. El encuellamiento es el nombre que se le da a la inestabilidad plástica de los metales, esto quiere decir que el flujo se localiza en una sección del espécimen, como se muestra en la figura 2.22, y si se continúa cargando el material se fracturará en la sección más delgada.

Si aplicamos una fuerza F en los extremos del espécimen de la figura 2.22 cualquier sección debe soportar esta carga. La pregunta es si todas las secciones son capaces de hacerlo. Supongamos que una de las secciones se deforma un poco más que las demás, como lo muestra la figura. Su sección transversal es menor y por lo tanto el esfuerzo que soporta es mayor que el que soportan las demás secciones. Si la fuerza de cedencia del material es mayor que la carga aplicada, la sección podrá soportar la carga F ; pero si este no es el caso el flujo plástico se localizará en esta región (el cuello) y el espécimen se fracturará en esta región. Este fenómeno se da en el máximo de la curva esfuerzo-deformación [29].

En general el acero medio puede deformarse bastante antes que empiece a presentar encuellamiento, el aluminio presenta inestabilidades de este tipo con poca deformación y el acero con bajo contenido de carbono, en ciertas ocasiones, puede presentar un encuellamiento estable, conocido como banda de Lüder, que se forma y se propaga sin causar fractura [29]. El encuellamiento, para aceros con bajo contenido de carbono, se puede observar en la figura 2.21; el encuellamiento estable coincide con punto superior de cedencia mientras que el inestable lo hace

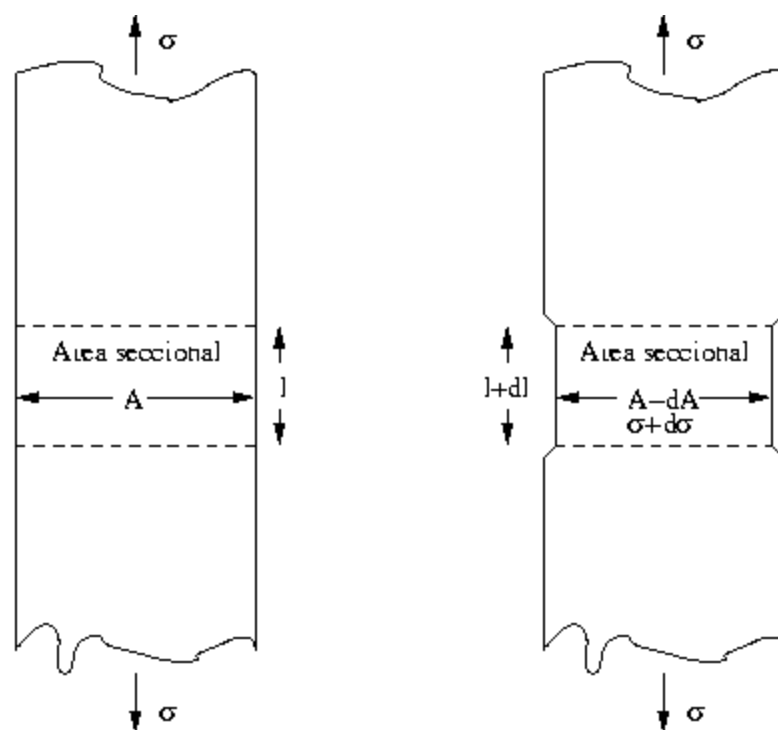


Figura 2.22: Formación de un cuello en una barra de material que se está deformando plásticamente.

con el máximo de la curva (ver también figura 2.20).

2.4. Teoría de la elasticidad

En esta sección introducimos los conceptos principales del cálculo de variaciones y desarrollamos algunos ejemplos importantes de esta rama de la matemática. El cálculo variacional ha sido una herramienta muy importante en el modelaje de sistemas físicos ya que permite enunciar principios fundamentales como el principio de Hamilton o de mínima acción. Además de exponer los principios de esta rama de las matemáticas damos una respuesta parcial a la siguiente pregunta: en qué caso existen minimizadores para un problema variacional? Esta pregunta hoy en día no tiene una respuesta total y por lo tanto es de gran interés. La respuesta parcial al cuestionamiento nos dice que si el funcional que se desea minimizar no es convexo no hay certeza sobre la existencia de minimizadores. Dada esta situación proponemos un método alternativo para encontrar soluciones a problemas no convexos llamado el método de las relajaciones semidefinidas.

Una vez descrito el formalismo del cálculo variacional pasamos a plantear un problema de este tipo para una barra elástica en una máquina universal. Los capítulos siguientes de este trabajo están centrados alrededor de este planteamiento variacional para un problema particular de elasticidad.

2.4.1. Cálculo variacional

El cálculo de variaciones es una rama de la matemática que tiene una aplicación clave en la física clásica y moderna. El problema que trata el cálculo variacional se expresa, comúnmente, de la siguiente manera: determinar las funciones $y(x)$ tales que la integral

$$J = \int_{\Omega} f[y(x), y'(x), x] dx \quad (2.6)$$

sea un extremo (es decir, tome un valor máximo o mínimo). Es común que además se presenten algún tipo de restricciones sobre las posibles soluciones. En la ecuación (2.6) $y'(x) \equiv Dy(x) \equiv \partial y_i / \partial x_j$ es el gradiente de la función $y(x)$ y el punto y coma adentro de f separa las variables independientes x de las dependientes $y(x)$ y su gradiente $y'(x)$. El funcional f se supone conocido al igual que la región Ω donde se lleva a cabo la integración. La idea básica es variar las funciones $y(x)$ hasta que se encuentre un valor extremo de J ; para la mayoría de los casos se busca que $y(x)$ retorne el valor mínimo. Esto quiere decir que si una función específica $y^* = y(x)$ genera un valor extremo de J entonces cualquier función vecina hará que el valor de éste cambie en el sentido no deseado (aumente si se está buscando un mínimo o disminuya en el caso contrario).

Comúnmente el problema expresado en la ecuación (2.6) se trata por medio de las ecuaciones de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx_i} \frac{\partial f}{\partial y'_i} = 0, \quad (2.7)$$

esta ecuación es una condición necesaria para que J sea un valor extremo [30].

Resolver el problema expresado en (2.6) vía las ecuaciones de Euler-Lagrange es el camino que se ha seguido desde el principio del cálculo de variaciones y sigue siendo un método ampliamente utilizado hoy en día. Algunos ejemplos de problemas resueltos vía este procedimiento son:

1. El problema de la *braquistocrona*, resuelto por primera vez por Johann Bernoulli (1667-1748) en 1696. Este problema se plantea cuál es el camino más corto, que sigue una partícula bajo la acción de un campo gravitacional, entre dos puntos fijos.
2. Superficie mínima de revolución generada por una línea que conecta dos puntos fijos, cuya solución es una *catenaria*. Problema resuelto en 1661, independientemente, por Huygens y Johan Bernoulli. El método utilizado por Huygens para resolverlo es de naturaleza geométrica mientras que J. Bernoulli utilizó el cálculo de variaciones.
3. Encontrar el camino más corto entre dos puntos de una superficie cualquiera, la solución es conocida como la línea *geodésica*.
4. Varios problemas de mecánica clásica, entre otros.

Es importante recalcar que el método de las ecuaciones de Euler-Lagrange (ecuación(2.7)) es el más conocido e importante procedimiento para tratar problemas del cálculo variacional.

El cálculo variacional se conecta con la física, tanto clásica como moderna, por medio del Principio de Hamilton; las ecuaciones de movimiento que resultan de aplicar tal principio se denominan comúnmente las ecuaciones de Lagrange.

El principio de Hamilton no está restringido a la dinámica de partículas y de hecho se aplica a una gran variedad de fenómenos físicos (en particular todo aquel que se relaciona con algún tipo de campo). Este principio ha permitido la unificación de teorías individuales, que se habían obtenido vía experimentación (leyes de Newton, Maxwell entre otras), bajo un postulado único. Es uno de los principios más elegantes y amplios de la física.

En términos del cálculo de variaciones el principio de Hamilton se puede expresar como

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} (T - U) dt = 0, \quad (2.8)$$

donde δ indica una variación de la integral, $T = T(dx/dt)$ es la energía cinética del sistema bajo estudio y $U = U(x)$ su energía potencial. Es común, mas no obligatorio, asociar la variable t con el tiempo y $x = x(t)$ como la posición del sistema que se está tratando. La función $L \equiv T - U = L(x, dx/dt; t)$ se

conoce como el Lagrangiano del sistema y es equivalente a la función f de la ecuación(2.6). $S = \int_{t_1}^{t_2} L(x, dx/dt) dt$, bajo esta formulación, se denomina la acción.

En palabras el principio de Hamilton se puede formular de la siguiente manera: *Todo sistema físico tiende a hacer que su acción sea un extremo*. En general se encuentra que el extremo encontrado coincide con la acción mínima del sistema.

Las ecuaciones de Lagrange que se derivan de (2.8) son equivalentes a las ecuación(2.7):

$$\frac{\partial L}{\partial x} - \frac{d}{dt} \frac{\partial f}{\partial x'} = 0, \quad (2.9)$$

con $x' = dx/dt$. Estas ecuaciones son fundamentales para el estudio de la física clásica [30, 31, 32] y su importancia es comparable a la del principio de Hamilton. Un problema en particular que se puede tratar vía un principio variacional equivalente al de Hamilton es el de la elasticidad en materiales [1, 5]. En este trabajo utilizaremos un principio variacional sobre un balance de energías adecuado para conocer la distribución energética de las microestructuras que se presentan en aceros con bajo contenido de carbono cuando son sometidos a deformaciones que los llevan a mostrar el fenómeno conocido como endurecimiento por deformación.

2.4.2. Problemas Variacionales No Convexos en Elasticidad

Una pregunta que hasta ahora no hemos abordado y a la cuál no se le buscó respuesta hasta el siglo pasado es: ¿cuáles son las características que debe tener $f[y(x), y'(x); x]$ en (2.6) para que existan minimizadores para J ? En otras palabras ¿qué tipo de funciones $y(x)$ aseguran la existencia de minimizadores para el funcional J ? La respuesta a este problema es todavía materia de estudio, pero un resultado importante es la necesidad de que J sea débilmente inferiormente semicontinuo en un espacio de funciones apropiadas [33]. Determinar las condiciones bajo las cuales tal condición se cumple no es fácil; recientemente se ha determinado que un requisito para la semicontinuidad débil inferior de J es la convexidad del integrando f en la variable $y'(x)$ [34]. Si f no es convexo en $y'(x)$ la existencia de minimizadores para J no se puede garantizar y las ecuaciones de Euler Lagrange no son un método efectivo para buscarlo. En estos casos se debe recurrir a otro tipo de métodos alternos como relajación, problemas generalizados y medidas de Young [6, 35]. Se hizo una exposición detenida de estos temas en el Capítulo 1.

Una función $g(x)$ es convexa en x si cumple la desigualdad de Jensen

$$g(\lambda a + (1 - \lambda)b) \leq \lambda g(a) + (1 - \lambda)g(b), \quad \forall \lambda \in [0, 1]. \quad (2.10)$$

En caso contrario se denomina no convexa. Los problemas variacionales no convexos aparecen con bastante frecuencia en teorías de elasticidad. Como ejemplo de tal ocurrencia explicaremos más adelante el problema de Bolza [2], que

está relacionado directamente con la teoría de barras elásticas unidimensionales. Esta teoría se desarrollará en la sección 3.2.

Una forma intuitiva de entender la no convexidad de una función a partir de la definición (2.10) es notando que una función que presente dos o más mínimos locales no puede ser convexa. Teniendo en cuenta esta propiedad es fácil ver que un potencial de deformación que caracterice un material con dos o más configuraciones de red distintas no puede ser convexo ya que este debe tener un mínimo local por configuración. En el caso de un material que pueda existir, por ejemplo, en una configuración de red bcc o fcc a la misma temperatura, y la proporción de estos dependa de condiciones externas, se deben observar en su potencial de deformación al menos dos mínimos locales; cada uno de estos mínimos corresponderá a una de estas posibles estructuras. La proporción que se observe de estas estructuras de red en el material es denominada la microestructura.

Definimos la microestructura de un material como un arreglo cualquiera que esté entre una escala macroscópica (en la que normalmente podemos hacer mediciones) y una escala atómica. Tales estructuras son abundantes en la naturaleza, entre ellas se encuentran muchas estructuras biológicas, el ordenamiento complejo de fisuras, grietas, vacíos e inclusiones en rocas, materiales artificiales reforzados y mezclas finas de fases en transiciones de fase de tipo sólido-sólido para mencionar unos pocos ejemplos. La microestructura influye de manera crucial el comportamiento macroscópico del material o sistema y es, en general, escogida (o generada) para optimizar alguna característica particular bajo ciertas condiciones (máxima resistencia bajo algún tipo de carga, mínima energía, máxima entropía, etc.). Es importante tener en cuenta que una microestructura observada corresponde a una configuración particular que minimiza, o tiende a minimizar de la mejor manera, la energía elástica del material [5].

El objetivo final de nuestro estudio es calcular las microestructuras que se presentan en modelos de elasticidad no lineal; proponemos alcanzar este objetivo utilizando el análisis de problemas variacionales no convexos donde el potencial de energía de deformación desempeña un papel predominante. Debido a las consideraciones físicas presentadas en este capítulo, tal potencial es en general una función no convexa del tensor de deformación, por lo cual debemos estudiar modelos más generales que contemplen esta situación. Esto nos lleva a proponer el método de relajaciones semidefinidas como un método válido para resolver problemas variacionales generalizados, cuando el potencial de energía de deformación admite una expresión polinomial con geometría no convexa.

Un problema no convexo no siempre carece de solución, de hecho las condiciones de frontera juegan un papel muy importante en la existencia de ésta. De otra forma, aunque el problema variacional no convexo carezca de solución el estudio de sus sucesiones minimizantes es muy importante puesto que el comportamiento de éstas tiene implicaciones en la situación física que el modelo representa.

Una idea inicial de lo que es una sucesión minimizante es imaginar una serie de estados que el sistema puede adquirir donde su energía es cada vez menor. Existen sistemas donde la transición al estado óptimo puede darse a través de

estados intermedios no continuos con energía cada vez menor, pero sin tener la certeza de obtener en algún punto el estado óptimo. Una sucesión de estos estados es lo que se desea representar como una sucesión minimizante.

Para un problema variacional no convexo se puede dar la situación más compleja en la que una sucesión de diferentes estados con niveles de energía cada vez menores, puede tomar lugar de muchas maneras distintas e incluso no haber ningún estado que adquiriera la energía óptima. De hecho existen trabajos sobre barras elásticas unidimensionales donde se analizan las posibles soluciones para el balance energético mínimo (3.5) [36, 37, 38]. En estos trabajos se analiza el comportamiento de una barra unidimensional sometida a una máquina universal de carga.

El trabajo [38] expone las condiciones que debe cumplir el funcional (3.5) para que existan soluciones y presenta una clasificación del tipo de soluciones que presenta (3.5) dependiendo de sus características. Los posibles equilibrios energéticos que puede presentar una barra de material dependen fuertemente del tipo de funcional y condiciones que se tengan en (3.5). De gran interés para este trabajo es la mención que se hace en [38] sobre la caída de carga en el experimento de una barra (ver Fig. 2.21); según este trabajo esta caída de carga no puede ser producida por un mínimo relativo fuerte de la energía total, en otras palabras el potencial de energía de deformación no puede ser convexo si pretende representar la fenomenología observada en la figura 2.21.

Los artículos [36] y [37] están centrados alrededor de la coexistencia de dos componentes elásticos homogéneos en la barra que generan microestructuras de escala finita donde se observa la mezcla de estos componentes. En estos dos trabajos se llega a la conclusión que el refinamiento de la mezcla de fases se puede interpretar como una manifestación de la necesidad que tiene el material de llegar al ínfimo de su energía elástica cumpliendo con las condiciones impuestas por la máquina. En resumen, estos trabajos explican las microestructuras (mezcla de dos estados del material) observadas en ciertas barras unidimensionales como una manifestación del material encontrando el ínfimo de su energía elástica. Este problema lo trabajaremos en el Capítulo 4 desde el punto de vista de las medidas de Young y el método de las relajaciones semidefinidas.

Capítulo 3

Problemas Variacionales No Convexos en Una Dimensión

Comenzamos haciendo una conexión entre los problemas variacionales y la elasticidad de materiales, junto con esto, mostramos cómo a partir de una curva esfuerzo-deformación podemos obtener la información suficiente para plantear el problema variacional. Seguidamente pasamos a discutir cómo un acero con bajo contenido de carbono, bajo la acción de una máquina universal, presenta un cambio en su estructura interna que se manifiesta como una alternancia de dos microestructuras distintas o, en otras palabras, el material sufre una transformación martensítica; la consecuencia de este fenómeno se puede ver en las curvas esfuerzo-deformación y se le llama endurecimiento por deformación.

En la sección 3.2 explicamos la relajación de problemas variacionales no convexos en una dimensión y su solución vía medidas de Young. Este método es ideal para problemas variacionales no convexos ya que nos permite encontrar la solución del problema o, en caso que esta no exista, sus sucesiones minimizantes. Para aplicar este procedimiento debemos entender un problema variacional como un problema de optimización en funciones sometidas a condiciones de frontera. La relajación del problema no convexo nos lleva a un problema de optimización convexo con restricciones no lineales. El problema relajado es un problema de programación matemática y se resuelve numéricamente con algoritmos de optimización. Como un ejemplo de este método presentamos un problema equivalente al de la elasticidad de la barra en una versión simplificada debida a Bolza.

Por último hacemos el cálculo de la microestructura de una barra de acero con bajo contenido de carbono utilizando su curva esfuerzo-deformación. La relajación de este problema y su solución vía relajaciones semidefinidas nos permite encontrar la configuración energética que asociamos con el ordenamiento de la microestructura que se observa en la transformación martensítica que sufre la barra bajo el efecto de las tensiones a las que la somete la máquina universal.

3.1. Problemas variacionales y elasticidad

La forma típica de una curva esfuerzo-deformación de un material elástico suele ser una recta para estados de tensión bajos; esta región se denomina de deformación elástica y se extiende desde el esfuerzo 0 hasta el límite elástico, ver Fig. 2.19. Para esfuerzos superiores al límite elástico la curva continúa creciendo, mostrando una curvatura negativa, esta región se denomina de deformación plástica (Fig. 2.20). Para ciertas aleaciones, especialmente aceros con bajo contenido de carbón, se observa la curva de la Fig. 2.21 donde hay una clara diferencia con el comportamiento de la región elástica en un punto de ruptura conocido como punto de ruptura superior o punto de fluencia. La región oscilante que se presenta después del punto de ruptura se asocia con deformación no homogénea, al finalizar esta oscilación se encuentra el punto de ruptura inferior y el material continúa presentando una deformación plástica, finalmente la curva llega al punto de ruptura del material. El interés principal de este trabajo es utilizar un principio macroscópico como el balance de energía (3.5) para obtener características de la microestructura del material cuando éste se encuentra en la región entre los puntos de ruptura. Este fenómeno es conocido también como endurecimiento por deformación.

En este tipo de materiales es fácil ver (sección 3.1.1) que el potencial de energía de deformación ϕ no es una función convexa de la deformación unitaria u' . Como motivación e introducción a las dificultades de trabajar con potenciales no convexos haremos una breve descripción de un problema con las mismas características pero en una versión muy simplificada debida a Bolza [2], quien estudió la situación desde el punto de vista del cálculo variacional. El modelo que exponremos propone la minimización del funcional

$$I(u) = \int_0^1 (1 - u'(x)^2)^2 + u(x)^2 dx, \quad (3.1)$$

bajo las condiciones de frontera

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (3.2)$$

Haremos una breve descripción del problema mostrando sus dificultades y en la sección 3.2.4 describiremos su solución vía el método de relaciones semidefinidas [39].

Para describir el comportamiento de una barra elástica, de longitud L , en una máquina universal, utilizamos una función $u(x)$ que representa el desplazamiento que sufre un punto x sobre la barra, respecto a su elongación original, cuando ésta está sujeta a algún tipo de deformación. La derivada de la función $u(x)$ con respecto a x es equivalente a la deformación unitaria ϵ de la ec. (2.5).

La derivada de u con respecto a x ($u'(x)$) se conoce como la deformación unitaria. El estrés (ecuación (2.4)) se define como

$$\sigma = \frac{\partial \phi(u'(x), x)}{\partial u'}. \quad (3.3)$$

También se asume que existe un potencial $\psi(u(x), x)$ encargado de generar las cargas sobre el cuerpo

$$b = -\frac{\partial \psi(u(x), x)}{\partial u}. \quad (3.4)$$

En general la barra puede ser no homogénea, esta característica se refleja en la dependencia de ϕ en x , por dos razones: hay secciones transversales (de tamaño y forma idénticos) en diferentes puntos de la barra con elasticidades distintas o hay secciones transversales con igual elasticidad pero diferente tamaño o forma; posiblemente existen las dos condiciones.

Uno de los extremos de la barra permanece fijo $u(0) = 0$ mientras que el otro extremo puede tener una condición diferente. Dentro de las distintas configuraciones $u(x)$ que el cuerpo pueda tomar este escogerá aquella que minimice el valor de la integral

$$E(u) = \int_0^L \phi(u'(x), x) + \psi(u(x), x) dx, \quad (3.5)$$

sujeta a las condiciones de frontera

$$u(0) = 0, \quad u(L) = u_L. \quad (3.6)$$

La integral de la ec. (3.5) representa el balance de energía total dada una configuración $u(x)$ [38]. Esta energía es la suma de dos cantidades: $\phi(u'(x), x)$ que identificamos con el potencial de energía elástica (energía acumulada por el material por unidad de longitud) y $\psi(u(x), x)$ el potencial de fuerzas externas que actúan sobre el cuerpo.

En el modelo propuesto $u'(x) = \frac{du(x)}{dx}$ es la deformación unitaria de la barra en cada punto, $\frac{\partial \phi}{\partial u'}$ representa el esfuerzo y $-\frac{\partial \psi}{\partial u}$ la fuerza en cada punto. El esfuerzo ($\frac{\partial \phi}{\partial u'}$), al que se somete una barra, se puede determinar experimentalmente en función de u' por medio de la máquina universal. La gráfica que se obtiene se conoce como la curva esfuerzo-deformación (ver figura 2.20).

Proponemos recuperar resultados similares a los presentados en las referencias [36, 37, 38] donde se hacen distintos tratamientos analíticos sobre una barra elástica unidimensional pero a través de técnicas de optimización. Los tres trabajos muestran que para este tipo de problemas el potencial de energía elástica no es una función convexa y tratan el problema de distintos puntos de vista. Los resultados obtenidos son también consistentes y la conclusión principal a la que llegan es que en la barra se presenta una micro-estructura de escala finita que minimiza de la mejor manera posible la ecuación (3.5). Esta micro-estructura es asociada con la coexistencia de dos fases sólidas, distintas, del material. Dependiendo de las condiciones de contorno que se impongan sobre la barra la proporción de estas fases varía. Este es el tipo de microestructura que esperamos obtener con los métodos propuestos en este trabajo.

3.1.1. Ajuste de datos de una curva esfuerzo-deformación

Nuestra propuesta es utilizar los métodos para estudiar problemas variacionales no convexos presentados en la sección 3.2 para obtener las sucesiones

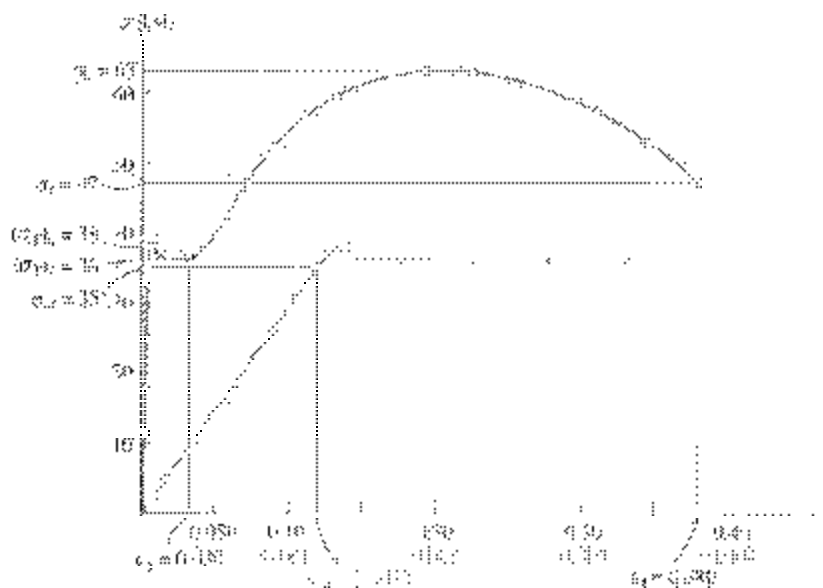


Figura 3.1: Curva esfuerzo-deformación para un acero de bajo carbono. Tomado de [28].

minimizantes que nos indicarían los porcentajes en los que se presentarían estas dos fases. Para llegar a nuestro objetivo planteamos el siguiente modelo:

1. Obtener una curva típica esfuerzo-deformación para un acero con bajo contenido de carbono. Hacemos un ajuste polinomial sobre los datos experimentales disponibles de la curva esfuerzo-deformación para aceros industriales. Este ajuste nos provee con una función aproximada de la curva que representa sus características más notorias.
2. Obtener el potencial de energía elástica de la barra a partir de la curva. Partiendo del polinomio obtenido de la curva esfuerzo-deformación podemos extraer el potencial de deformación (3.3) vía integración. Mostramos que no es convexo y calculamos su envoltura convexa.
3. Una vez tenemos el potencial de deformación procedemos a plantear el problema de optimización equivalente que nos permite, utilizando el método de los momentos, encontrar las sucesiones minimizantes ideales para la minimización de (3.5).
4. Hacemos un análisis de los resultados obtenidos.

La curva típica esfuerzo-deformación la obtenemos de [28], ver Fig 3.1. Esta curva está en unidades de ksi para σ ($1 \text{ ksi} \approx 6.88 \text{ MPa}$). Note que la región elástica está detallada (gráfica de color más claro) dentro de la misma gráfica.

σ (ksi)	ϵ	σ (ksi)	ϵ
0.	0	0.00281	36
0.000156	4.75	0.003	36
0.000356	10.14	0.00333	36
0.000492	14.89	0.03	36
0.000692	20.34	0.069	46.5
0.000879	25.36	0.0909	52.43
0.00107	30.97	0.14	59.74
0.0012	35	0.19	63
0.001419	38	0.23	62.84
0.00146	36	0.26	61.51
0.00177	36	0.31	57.55
0.002	36	0.35	52.91
0.00229	36	0.38	47

Cuadro 3.1: Datos extraídos de la figura 3.1.

En esta representación podemos observar los distintos valores que describen las propiedades mecánicas del material: el módulo de elasticidad se puede encontrar utilizando las parejas de puntos, (ϵ, σ) , $(0, 0)$ y $(0,00012,35)$. El punto superior de cedencia está en $(0,0015,38)$, y el inferior en $(0,030,36)$. La resistencia tensil se encuentra en 63 ksi (434 MPa) y el punto de fractura en $(0,380,47)$.

De esta gráfica obtenemos la tabla de datos, tabla 3.1, para el esfuerzo y la deformación de la muestra.

Sobre estos datos hacemos un ajuste de un polinomio de tercer grado para obtener una función $\sigma(\epsilon)$. El polinomio de grado tres en ϵ que proponemos es

$$\sigma(\epsilon) = 1016364\epsilon - 4664,61\epsilon^2 + 6195,87\epsilon^3. \quad (3.7)$$

La Fig. 3.2 muestra este polinomio superpuesto a los datos de la tabla 3.1. Como se puede observar el polinomio reproduce el comportamiento de la curva esfuerzo-deformación. La finalidad de proponer este polinomio es poder extraer el potencial de energía elástica utilizando la definición de la ecuación (3.3).

Utilizando la ecuación (3.7) y la definición (3.3) encontramos el potencial $\phi(\epsilon) = \int \sigma(\epsilon) d\epsilon$

$$\phi(\epsilon) = 508,319\epsilon^2 - 1554,87\epsilon^3 + 1548,968\epsilon^4 \quad (3.8)$$

De la gráfica de ϕ en función de ϵ (Fig. 4.1) es fácil darse cuenta que el potencial no es convexo en la variable ϵ , desarrollaremos éste planteamiento más detalladamente en el capítulo 4. Este potencial es el primer término de la integral en la ecuación (3.5).

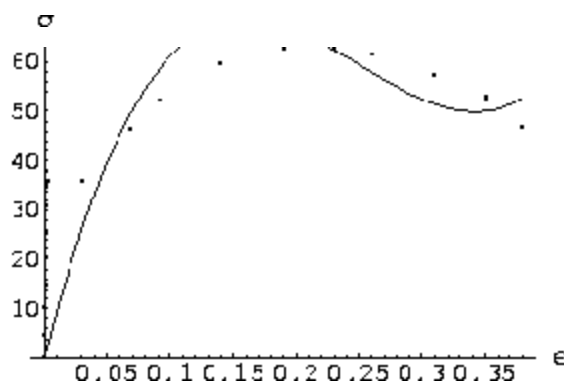


Figura 3.2: Superposición de los datos de la tabla 3.1 (en puntos) y el polinomio de la ecuación (3.7) (línea sólida).

3.2. Teoría de relajación y medidas parametrizadas

En esta sección explicamos los fundamentos y las herramientas matemáticas para obtener la solución o información sobre las sucesiones minimizantes para un problema de optimización no convexo. En este capítulo describiremos una propuesta alterna a la de las ecuaciones de Hamilton [30] para tratar el mismo tipo de problemas, bajo condiciones de no convexidad en el integrando, conocida como el método de los momentos o relajaciones semidefinidas [39]. Este método nos permitirá tratar el balance de energía para una barra de acero con un bajo contenido de carbono. La razón de no utilizar las ecuaciones de Hamilton radica en la no convexidad del integrando, como se indicó previamente la no convexidad no nos permite asegurar la existencia de un minimizador.

Como se explicó en la sección 2.4.2 el método clásico para solucionar problemas variacionales es utilizar las ecuaciones de Euler-Lagrange (ecuación (2.7)) para encontrar las funciones $y(x)$ que hacen que J en (2.6) sea un extremo. Este método nos lleva a obtener un conjunto de ecuaciones diferenciales. En otras palabras las ecuaciones de Euler-Lagrange nos permiten encontrar las funciones $y^*(x)$ que minimizan J .

Una forma alterna de ver los problemas variacionales es desde el punto de vista de la optimización. El problema planteado por la ecuación (2.6) se puede reformular como un problema de optimización: encontrar

$$\min_{y(x)} \int_{x_1}^{x_2} f[y(x), y'(x); x] dx \quad (3.9)$$

sujeto a las restricciones pertinentes del problema.

Por ejemplo, el problema de Bolza de la sección 3.2.4 se puede ver de la

siguiente manera:

$$\min_{y(x)} \int_0^1 (1 - y'(x)^2)^2 + y(x)^2 dx, \quad (3.10)$$

sujeto a

$$y(0) = y(1) = 0. \quad (3.11)$$

Cualquiera de las dos formulaciones debería llevarnos a la respuesta correcta pero, como ya se explicó previamente, las ecuaciones de Euler-Lagrange no son apropiadas debido a la no convexidad del integrando en $y'(x)$. Abordar este tipo de problemas como problemas de optimización y no como de ecuaciones diferenciales nos lleva a evitar complicaciones que se presentan debido a la no convexidad del integrando.

Para tratar problemas variacionales no convexos se ha desarrollado una teoría analítica basada en medidas de Young. La idea básica surgió en el estudio de problemas de control óptimo, para el caso en que la familia de controles no es convexa. La falta de convexidad hace que el problema carezca de solución en el contexto de las funciones absolutamente continuas [4, 11]. Los avances hechos en esta dirección se reúnen en una serie de resultados conocidos como teoremas de relajación [1, 4].

Cuando el integrando del problema (2.6) no es convexo en la componente $y'(x)$, se plantea un problema variacional alternativo al que se llamará problema relajado [1]. Este problema consiste en minimizar el funcional $\bar{J}$, llamado funcional relajado, definido como

$$\bar{J}(y) = \int_{\Omega} f_c[y(x), y'(x); x] dx, \quad (3.12)$$

donde el nuevo integrando f_c es la envolvente convexa de f en las variables $y'(x)$.

La envolvente convexa f_c de una función f se puede definir como la más grande de las funciones convexas menores que f ,

$$f_c(x) = \sup \{g(x) : g \text{ es convexa y } \forall r \text{ se cumple } g(r) \leq f(r)\}. \quad (3.13)$$

Este nuevo problema, al ser convexo, tiene solución en el espacio de funciones correspondiente. El cálculo de envolturas convexas se tratará en la sección 3.2.2.

De la definición (3.13) es evidente que

$$\min_y \bar{J}(y) \leq \inf_y J(y) \quad (3.14)$$

debido a que la envolvente convexa cumple con la propiedad $f_c \leq f$.

Para determinar la existencia de minimizadores de J debemos aclarar si la desigualdad (3.14) puede ser una igualdad. Esto es cierto en algunos casos y se presenta en forma de los llamados teoremas de relajación. Cuando se cuenta con la igualdad

$$\min_y \bar{J}(y) = \inf_y J(y) \quad (3.15)$$

se pueden emplear elementos de análisis y topología para estudiar los minimizadores del funcional J [1, 4].

Los teoremas de relajación permiten concluir que los minimizadores para $\bar{J}$ son los límites débiles de las sucesiones minimizantes para el funcional J , entendiendo como sucesiones minimizantes a una sucesión de funciones admisibles u_n tal que

$$J(u_n) \rightarrow \inf_y J(y) \quad (3.16)$$

cuando $n \rightarrow \infty$.

Para completar este análisis se introduce un nuevo funcional generalizado definido como

$$\bar{J}(\nu) = \int_{\Omega} \left(\int_{\mathbf{R}} f[y(x), \lambda; x] d\mu_x(\lambda) \right) dx \quad (3.17)$$

donde

$$\nu = \{\mu_x : x \in \Omega\} \quad (3.18)$$

es una familia de medidas de probabilidad μ_x parametrizadas por los puntos x en el dominio del problema. A una familia ν como (3.18) se le denomina medida de Young. Cada medida de Young debe cumplir con la relación

$$y'(x) = \int_{\mathbf{R}} \lambda d\mu_x(\lambda) \quad (3.19)$$

la cual permite obtener el término $y(x)$ en (3.17) a partir de ν y las condiciones de frontera del problema.

El teorema de Caratheodory implica que el funcional generalizado $\bar{J}$ obtiene su mínimo en las medidas óptimas μ_x^* que determinan la envolvente convexa de la función $f[y^*(x), \lambda; x]$ respecto a la variable λ [15], donde $y^*(x)$ es un minimizador para el funcional relajado $\bar{J}$. Esto significa que se deben cumplir las relaciones

$$f_c[y^*(x), \lambda^*; x] = \int_{\mathbf{R}} f_c[y^*(x), \lambda; x] d\mu_x^*(\lambda) \quad (3.20)$$

y

$$\bar{y}'^*(x) = \int_{\mathbf{R}} \lambda d\mu_x^*(\lambda) \quad (3.21)$$

donde $\bar{y}'^*(x)$ indica la solución del problema relajado (3.12). Este resultado demuestra que los tres funcionales que hemos tratado: el funcional J , del problema original no convexo, $\bar{J}$ del problema relajado y $\bar{J}$ para el problema generalizado comparten el mismo valor ínfimo

$$\inf_y J(y) = \min_y \bar{J}(y) = \min_{\nu} \bar{J}(\nu) \quad (3.22)$$

El estudio de la teoría de las medidas de Young [4], demuestra que la medida de Young óptima ν^* para el problema generalizado (3.17) contiene la información acerca del comportamiento límite de las sucesiones minimizantes para el

problema relajado (3.12) en el siguiente sentido: para cada sucesión minimizante u_n del funcional J se cumple la relación

$$\int_B d\mu_x^* = \Pr \left(\lim_{n \rightarrow \infty} u_n'(x) \in B \right) \quad (3.23)$$

donde $\Pr$ significa probabilidad y B un conjunto boreliano cualquiera en $\mathbb{R}^n$.

Es importante resaltar que la ecuación (3.23) muestra que la solución en medidas parametrizadas determina la existencia de minimizadores para el funcional J . Por ejemplo, si todos los miembros μ_x^* de la solución son medidas soportadas en un único punto podemos concluir que el funcional J tiene un minimizador en el espacio de funciones correspondiente. Además podemos determinar el minimizador $y^*(x)$ para J integrando la expresión

$$y'^*(x) = \int_{\mathbf{R}} d\mu_x^*. \quad (3.24)$$

Por el contrario, si algunas de las medidas parametrizadas óptimas μ_x^* que forman la solución al problema generalizado están soportadas en más de un punto, concluimos que el funcional J carece de minimizadores. En esta situación podemos utilizar (3.23) para comprender el comportamiento límite de sus sucesiones minimizantes. El soporte de cada μ_x^* nos indica los posibles valores que puede tomar el gradiente $y'^*(x)$ cuando $n \rightarrow \infty$, en cada punto $x \in \Omega$ y para cualquier sucesión minimizante u_n del funcional J .

3.2.1. Relajaciones semidefinidas

Como habíamos expuesto en la sección anterior, un problema variacional generalizado está definido por un funcional

$$\bar{J}(y) = \int_{x_0}^{x_1} \left(\int_{\mathbf{R}} f[y(x), \lambda; x] d\mu_x(\lambda) \right) dx \quad (3.25)$$

bajo condiciones iniciales

$$y(x_0) = y_0 \quad y(x_1) = y_1, \quad (3.26)$$

$$y'(x) = \int_{\mathbf{R}} \lambda d\mu_x(\lambda) \quad (3.27)$$

donde el integrando f puede no ser convexo en la variable derivada λ pero debe tener estructura polinomial general de la siguiente forma.

$$f[y(x), \lambda; x] = \sum_{k=0}^{2n} a_k(y(x), x) \lambda^k. \quad (3.28)$$

El problema generalizado (3.25) es un problema de optimización que se compone de un funcional convexo, definido sobre una familia convexa de elementos:

las medidas de Young. Aparentemente el problema resulta bastante difícil debido a la complejidad de estos objetos, sin embargo el teorema de Caratheodory garantiza que la solución óptima se obtiene en una familia de medidas parametrizadas soportadas en un conjunto muy reducido de puntos [4, 39].

La solución en medidas de Young, para el problema (3.25)-(3.27), $\nu^* = \{\mu_x^* : 0 \leq x \leq 1\}$ se encuentra tomando cada medida parametrizada óptima μ_x^* como la medida que determina la envoltura convexa de la función $f[y^*(x), \lambda; x]$ en el punto $y^{t*}(x)$ en el sentido

$$f_c[y^*(x), y^{t*}(x); x] = \int_{\mathbf{R}} f_c[y^*(x), \lambda; x] d\mu_x^*(\lambda). \quad (3.29)$$

Dado que f tiene estructura polinomial en λ su envoltura convexa está dada por

$$f_c[y^*(x), \lambda; x] = \sum_{k=0}^{3n} a_k(y^*(x), x) m_k^*(x) \quad (3.30)$$

con $m_k^*(x)$ la solución al programa matemático:

$$\min_{m_k(x)} \sum_{k=0}^{3n} a_k(y^*(x), x) m_k(x). \quad (3.31)$$

Estas nuevas variables de diseño $m_k(x)$ forman una matriz de Hankel

$$H(x) = (m_{k+l}(x))_{k,l=0}^n = \begin{pmatrix} m_0 & m_1 & \cdots & m_n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_{n+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_n & m_{n+1} & \cdots & m_{2n} \end{pmatrix}, \quad (3.32)$$

con $0 \leq x \leq 1$, porque $m_k(x)$ representa el momento de orden k de la medida parametrizada. La matriz $H(x)$ es cuadrada (dimensión $(n+1) \times (n+1)$), simétrica y los elementos sobre las diagonales secundarias coinciden. Esta matriz debe ser semidefinida positiva con $m_0(x) = 1$; condición necesaria para que los valores $m_k(x)$ sean los momentos de orden k de una medida de probabilidad parametrizada μ_x .

Las soluciones $m_k^*(x)$ corresponden a los momentos algebraicos de la medida óptima μ_x^* que determina la envoltura convexa de f en (3.29).

De una manera un poco más resumida, el problema (3.25)-(3.27) se transforma en resolver el siguiente problema de optimización

$$\min_m D(m) = \sum_{i=1}^N \left(\sum_{k=0}^{3n} a_k(y(x_i), x_i) m_k(x_i) \right) \Delta x_i \quad (3.33)$$

con m una función vectorial $m(x_i) = (m_0(x_i), \dots, m_{3n}(x_i))$; sometida a las restricciones, en general no lineales, que garantizan que cada matriz de Hankel

$H(x_i)$ sea semidefinida positiva con $m_0(x_i) = 1$ y $m_1(x_i) = y'(x_i)$ [39], o lo que es equivalente

$$y(x_i) = y_0 + \sum_{j=1}^i m_1(s_j) \Delta_j \quad (3.34)$$

En las ecuaciones (3.33) y (3.34) se han discretizado las integrales tomando una malla de N puntos sobre el intervalo al que aplica la expresión (3.25). Este nuevo problema se denomina relajación semidefinida del problema original.

La relajación semidefinida nos permite encontrar los vectores $m^*(x_i)$ y, a partir de ellos, la solución al problema original 2.6. Puesto que la función $f[y^*(x), \lambda; x]$ depende de la variable unidimensional λ , el teorema de Caratheodory afirma que su envoltura convexa, $f_c[y^*(x), \lambda; x]$, se puede determinar empleando una combinación convexa de, a lo sumo, dos puntos. Esto implica que la medida $\mu^*(x_i)$ está soportada como máximo en dos puntos y para reconstruirla necesitamos solamente tres de sus momentos algebraicos: $m_1^*(x_i)$, $m_2^*(x_i)$ y $m_3^*(x_i)$. De estas tres cantidades podemos extraer los puntos $t_1(x_i)$ y $t_2(x_i)$, en los que están soportadas las medidas y los pesos, $\lambda_1(x_i)$, $\lambda_2(x_i) = 1 - \lambda_1(x_i)$, correspondientes a cada punto t_i .

Como se había mencionado previamente si el integrando del problema original, (2.6), es convexo, entonces el problema tiene solución y la medida de Young óptima para el problema generalizado estará compuesta por medidas parametrizadas óptimas soportadas en un sólo punto. Este caso lo podemos identificar fácilmente ya que $m_2^*(x_i) = (m_1^*(x_i))^2$ y por consiguiente el punto donde está soportada la medida es el primer momento, por lo tanto: $t_1(x_i) = t_2(x_i) = m_1^*(x_i)$; y los pesos correspondientes son: $\lambda_1(x_i) = 1$ $\lambda_2(x_i) = 0$.

En caso contrario, $m_2^*(x_i) < (m_1^*(x_i))^2$, y el problema está soportado sobre dos puntos. Para encontrarlos se puede utilizar la fórmula cuadrática

$$P(t) = \begin{vmatrix} 1 & m_1^*(x_i) & m_2^*(x_i) \\ m_1^*(x_i) & m_2^*(x_i) & m_3^*(x_i) \\ 1 & t & t^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (3.35)$$

cuyas raíces, $t_1(x_i) < t_2(x_i)$, son los puntos de soporte de la medida parametrizada óptima en x_i . Las formulas

$$\lambda_1(x_i) = \frac{t_2(x_i) - m_1^*(x_i)}{t_2(x_i) - t_1(x_i)} \text{ y } \lambda_2(x_i) = \frac{m_1^*(x_i) - t_1(x_i)}{t_2(x_i) - t_1(x_i)} \quad (3.36)$$

proporcionan los pesos de cada punto $t_j(x_i)$. Con estos valores obtenemos, finalmente, la medida discreta

$$\mu^*(x) = \lambda_1(x)\delta_{t_1}(x) + \lambda_2(x)\delta_{t_2}(x) \quad (3.37)$$

donde $\delta_{t_i}(x)$ representa el delta de Dirac.

Las siguientes secciones tratan los temas de las envolturas convexas y el estudio de las sucesiones minimizantes, concluimos el capítulo desarrollando el ejemplo de Bolza bajo el método de relajaciones semidefinidas.

3.2.2. Cálculo de envolventes convexas

En esta sección presentaremos una definición más detallada de la envolvente convexa de una función, expondremos el teorema de Caratheodory para funciones y haremos un desarrollo general para encontrar envolventes convexas para polinomios de cuarto grado.

La envolvente convexa de una función continua y acotada inferiormente $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ está definida por la expresión

$$f_c(t) = \max_g g(t) \quad (3.38)$$

donde g representa las funciones convexas que acotan inferiormente a f . La envolvente convexa de una función es la mayor función convexa que la acota inferiormente. Los puntos mínimos para la envolvente f_c son los mínimos globales de f . En general $f_c \leq f$ y los puntos en que $f_c = f$ indican la región en que f es convexa. La función f es convexa si y solo si $f = f_c$ en todo punto de su dominio.

Un resultado que ya hemos invocado y que tiene una gran importancia para nuestro trabajo es el teorema de Caratheodory. Este teorema se manifiesta en dos formas, una para conjuntos y otra para funciones. Para una demostración detallada y mayor profundidad en los aspectos básicos del análisis convexo ver [15].

Teorema 1 (Teorema de Caratheodory para funciones) *Dada una función continua y coerciva $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ su envolvente convexa está definida como*

$$f_c(t) = \min_{\sum_{k=1}^n \lambda_k t_k = t} \lambda_1 f(t_1) + \cdots + \lambda_n f(t_n) \quad (3.39)$$

donde el mínimo contempla todas las combinaciones convexas finitas que igualan a t . El óptimo siempre se obtendrá en una combinación convexa con $n+1$ puntos a lo sumo.

Este resultado permite incorporar el concepto de distribución de probabilidad en nuestro estudio porque cada combinación convexa $\lambda_1 f(t_1) + \cdots + \lambda_n f(t_n)$ puede identificarse con una distribución de probabilidad discreta soportada en los puntos $t_1, \dots, t_n$ con pesos $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ respectivamente. La combinación convexa

$$\lambda_1 f(t_1) + \cdots + \lambda_n f(t_n)$$

puede representarse en forma concisa como la medida de probabilidad

$$\mu = \sum_{i=1}^n \lambda_i \delta_{t_i}$$

donde δ_{t_i} es la delta de Dirac soportada en el punto t_i .

Por lo tanto la envolvente convexa de f puede expresarse como el problema de optimización

$$f_c(t) = \min_{\mu} \int_{\mathbf{R}} f(\lambda) d\mu(\lambda), \quad (3.40)$$

donde μ representa la familia de distribuciones de probabilidad con valor medio (media) en el punto t . El teorema de Caratheodory garantiza que el óptimo se alcanza en una medida soportada en $n + 1$ puntos o menos.

Cuando la función f es un polinomio con la forma general

$$f(t) = \sum_{k=0}^{2n} a_k t^k \quad a_{2n} > 0 \quad (3.41)$$

el problema (3.40) se transforma en un nuevo problema de optimización

$$f_c(t) = \min_{m_k} \sum_{k=0}^{2n} a_k m_k \quad (3.42)$$

donde las variables m_k son los momentos de distribución de probabilidad con valor medio t .

El método de los momentos ofrece un camino que permite encontrar la envolvente convexa cuando la función f es un polinomio. Es importante destacar que la teoría expuesta garantiza que la solución del problema de programación (3.42) contiene la información necesaria para determinar la envolvente convexa del polinomio f en un punto t . Sin embargo no hay ninguna prescripción sobre el método de optimización que podemos utilizar para solucionarlo. El método de solución se puede escoger a conveniencia en cada caso. A continuación emplearemos un método analítico para encontrar la envoltura convexa de un polinomio genérico de cuarto grado.

Ejemplo: Polinomio Genérico de Cuarto Grado

Un polinomio arbitrario de cuarto grado, sin pérdida de generalidad, está descrito por la expresión

$$f(t) = a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + a_3 t^3 + t^4. \quad (3.43)$$

Su envolvente convexa en un punto t está definida por el problema de optimización

$$f_c(t) = \min_{m_k} a_0 + a_1 t + a_2 m_2 + a_3 m_3 + m_4. \quad (3.44)$$

donde las variables m_k están restringidas de tal manera que la matriz de Hankel

$$H = \begin{pmatrix} 1 & t & m_2 \\ t & m_2 & m_3 \\ m_2 & m_3 & m_4 \end{pmatrix}$$

es semidefinida positiva. H cumple esta condición si y sólo si se cumplen las siguientes desigualdades: $m_2 \geq t^2$, $m_4 \geq m_2^2$ y $|H| \geq 0$.

Por lo tanto el problema de programación consiste en minimizar la función de coste

$$C = a_2 m_2 + a_3 m_3 + m_4$$

bajo las restricciones no lineales

$$\begin{aligned} m_2 - t^2 &\geq 0 \\ m_4 - m_3^2 &\geq 0 \\ m_3m_4 + 2tm_3m_2 - m_2^3 - m_3^3 - t^2m_4 &\geq 0. \end{aligned} \quad (3.45)$$

La convexidad de este problema facilita su tratamiento.

Separamos dos situaciones excluyentes. En el primer caso suponemos $m_2 = t^2$ y el determinante de H se reduce a

$$|H| = -(t^3 - m_3)^2$$

de manera que la condición $|H| \geq 0$ implica $|H| = 0$ y $m_3 = t^3$. Por estas razones el problema original se transforma en encontrar

$$\text{mín } m_4$$

bajo la restricción $m_4 \geq t^4$ cuya solución es $m_4^* = t^4$. Vemos así que bajo la suposición $m_2 = t^2$ el problema tiene la solución trivial

$$m_k^* = t^k \quad k = 2, 3, 4$$

que proporciona la medida óptima

$$\mu_t^* = \delta_t$$

que corresponde a la combinación convexa trivial $t_1 = t$ con $\lambda_1 = 1$.

En el caso $m_2 > t^2$ la matriz de Hankel H es semidefinida positiva si y sólo si se cumple la desigualdad

$$|H| = m_3m_4 + 2tm_3m_2 - m_2^3 - m_3^3 - t^2m_4 \geq 0$$

de manera que podemos prescindir de la segunda restricción en (3.45). Para poder resolver este problema de optimización bajo esta restricción podemos utilizar las ecuaciones de Kuhn-Tucker:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} C - \gamma \vec{\nabla} |H| &= 0 \\ |H| &= 0 \end{aligned}$$

que toman la forma explícita

$$(m_4 - m_3^2)(m_2 - t^2) = (tm_2 - m_3)^2 \quad (3.46)$$

$$\frac{a_3}{2}(m_2 - t^2) = tm_2 - m_3 \quad (3.47)$$

$$a_3(m_2 - t^2) = -3m_2^2 + 2t^2m_2 - 2t(tm_2 - m_3) + m_4 \quad (3.48)$$

después de haber despejado el multiplicador de Lagrange λ y de haber empleado la suposición $m_2 > t^2$. Ahora combinamos (3.47) y (3.48) para eliminar m_3 y obtener

$$(a_3 + ta_3)(m_2 - t^2) = 2m_2(t^2 - m_2) + m_4 - m_2^2,$$

y de (3.46) y (3.48), también eliminando m_3 , obtenemos

$$m_4 - m_2^3 = \frac{a_3^3}{4}(m_2 - t^3),$$

por último combinamos las dos ecuaciones previas para deducir la igualdad

$$\left(a_3 + ta_3 - \frac{a_3^3}{4}\right)(m_2 - t^3) = -2m_3(m_2 - t^3).$$

De este desarrollo podemos encontrar los momentos óptimos del problema (3.44):

$$\begin{aligned} m_2^* &= -\frac{a_3}{2} + \frac{a_3^3}{8} - \frac{a_3}{2}t \\ m_3^* &= \frac{a_3a_3}{4} - \frac{a_3^3}{16} + \left(\frac{3}{8}a_3^3 - \frac{a_3}{2}\right)t \\ m_4^* &= \frac{a_3^3}{4} - \frac{a_3a_3^3}{4} + \frac{3}{64}a_3^4 + \left(\frac{a_3a_3}{2} - \frac{a_3^3}{4}\right)t. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Finalmente, la envolvente convexa del polinomio f está dada por

$$f_c(t) = a_0 + a_1t + a_2m_2^* + a_3m_3^* + m_4^*$$

que reemplazando con la solución (3.49) es

$$f_c(t) = \frac{1}{64}(64a_0 - 16a_3^3 + 8a_3a_3^3 - a_3^4) + \frac{1}{8}(8a_1 - 4a_3a_3 + a_3^3)t \quad (3.50)$$

la ecuación de una línea recta.

Se han obtenido dos situaciones posibles:

- Cuando $m_2 = t^3$ los momentos óptimos toman la forma

$$m_k^* = t^k \quad k = 2, 3, 4$$

y la envolvente convexa de f es ella misma.

$$f_c(t) = f(t) = a_0 + a_1t + a_2t^3 + a_3t^3 + t^4. \quad (3.51)$$

- Cuando $m_2 > t^3$ la envolvente convexa está dada por la ecuación (3.50) que corresponde a una recta.

Estas dos situaciones describen dos regiones geométricas: la región de convexidad ($f_c(t) = f(t)$) y la de no convexidad ($f_c(t) < f(t)$). Para determinar por completo la envolvente convexa de f debemos definir con exactitud estas regiones.

Para ello igualamos (3.50) y (3.51) ya que en los puntos limítrofes ambas expresiones deben ser válidas. Se obtienen las ecuaciones

$$\begin{aligned} t^3 &= -\frac{a_2}{2} + \frac{a_3^2}{8} - \frac{a_3}{2}t \\ t^3 &= \frac{a_2a_3}{4} - \frac{a_3^3}{16} + \left(\frac{3}{8}a_3^2 - \frac{a_2}{2}\right)t \\ t^4 &= \frac{a_2^2}{4} - \frac{a_2a_3^2}{4} + \frac{3}{64}a_3^4 + \left(\frac{a_2a_3}{2} - \frac{a_3^3}{4}\right)t \end{aligned}$$

que dan las soluciones

$$t_{1,2} = -\frac{a_2}{4} \pm \frac{1}{4}\sqrt{3a_3^2 - 8a_2} \quad (3.52)$$

que son los extremos del intervalo donde la envolvente convexa es una recta.

Resumiendo, la expresión completa para la envolvente convexa de un polinomio general de cuarto grado es

$$f_c(t) = \begin{cases} a_0 + a_1t + a_2t^2 + a_3t^3 + t^4 & \text{cuando } |4t + a_2| \geq \sqrt{3a_3^2 - 8a_2} \\ \frac{1}{64}(64a_0 - 16a_2^2 + 8a_2a_3^2 - a_3^4) + \frac{1}{8}(8a_1 - 4a_2a_3 + a_3^3)t & \text{cuando } |4t + a_2| \leq \sqrt{3a_3^2 - 8a_2} \end{cases} \quad (3.53)$$

siempre que

$$3a_3^2 - 8a_2 \geq 0.$$

En caso contrario el polinomio es convexo y se tiene $f_c = f$ en todos los puntos y no existen los puntos $t_{1,2}$ que señalan la región de no convexidad.

3.2.3. Comportamiento de las Sucesiones Minimizantes

Las medidas óptimas parametrizadas en los puntos de la malla contienen la información relevante acerca del problema original y el comportamiento límite en las sucesiones minimizantes del funcional J . Como ya se ha mencionado antes, cada medida óptima $\mu^*(x_i)$ debe estar soportada en uno o dos puntos. De esta característica depende el comportamiento de las sucesiones minimizantes del problema original.

- **Soporte unitario:** Para el caso de soporte unitario tenemos $\mu^*(x_i) = \delta_{y_i}$. Esto quiere decir que en torno al punto x_i de la malla las sucesiones minimizantes $\{u_n\}$ para J no presentan alternancia en la derivada,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} u'_n(x_i) = y_i. \quad (3.54)$$

Si esta situación se presenta para todos los puntos x_i de la malla, entonces el funcional J tiene un minimizador $y^*(x)$ y podemos estimarlo a partir del valor de su derivada

$$y_i = u'^*(x_i) \quad (3.55)$$

y las condiciones iniciales en la forma:

$$u^*(x_i) = y_0 + \sum_{j=0}^i y_j \Delta x_j \quad (3.56)$$

- **Soporte doble:** Cuando una o más medidas óptimas están soportadas en dos puntos $\mu^*(x_i) = \lambda_1(x_i)\delta_{t_1}(x_i) + \lambda_3(x_i)\delta_{t_3}(x_i)$ con $\lambda_1, \lambda_3 > 0$, entonces podemos inferir que el funcional J carece de minimizadores. En esta situación el comportamiento límite de las sucesiones minimizantes de J , en torno al punto x_i de la malla, está determinado por los valores $\lambda_1, \lambda_3, t_1$ y t_3 de (3.37). Cuando $\{u_n\}$ es una sucesión minimizante para J , la pendiente de cada término $u'_n(x_i)$ alternará entre los valores t_1 y t_3 cuando $n \rightarrow \infty$. La alternancia entre estos valores estará regida por las proporciones λ_1 y λ_3 respectivamente.

Como se ha explicado a lo largo del capítulo el método de los momentos nos permite transformar un problema variacional (2.6), no convexo, en un problema equivalente, relajado, de optimización (3.12), que a su vez se convierte en un programa matemático convexo (3.33) que llamamos relajación semidefinida. La forma más eficiente para tratar este problema matemático es vía métodos numéricos específicos para problemas de optimización en gran escala. En los capítulos siguientes haremos una detallada descripción de diferentes paquetes comerciales que se ajustan a las necesidades del problema (3.33).

3.2.4. Ejemplo de Bolza

Como ejemplo de análisis de un problema variacional no convexo utilizando el método de relajaciones semidefinidas tomamos el ejemplo de Bolza. Pretendemos minimizar funcionales de la forma

$$J(u) = \int_0^1 (1 - u'(x)^2)^2 + u(x)^2 dx, \quad (3.57)$$

bajo las condiciones de frontera

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (3.58)$$

Ya hemos mencionado que la existencia de soluciones depende de las condiciones de frontera y mostramos la dificultad con que se encuentran los métodos numéricos al tratar las condiciones (3.58). En este apartado utilizaremos el método de los momentos para mostrar la no existencia de soluciones para este problema en particular, obtendremos también las sucesiones minimizantes correspondientes a (3.57) y de aquí la microestructura asociada.

Comenzamos notando que el integrando tiene una forma polinomial en la variable derivada:

$$f(x, u, \lambda) = 1 - 2\lambda^2 + \lambda^4 + u^2. \quad (3.59)$$

Esta característica nos permite aplicar el método de relajaciones semidefinidas. Debemos entonces minimizar el funcional

$$J(m) = \int_0^1 1 - 2m_2(x) + m_4(x) + u(x)^2 dx,$$

donde

$$u(x) = \int_0^x m_1(s) ds.$$

Bajo las restricciones que garantizan que las variables $m_k(x)$ sean momentos algebraicos de una medida de probabilidad, para ello la matriz de Hankel

$$H(x) = \begin{pmatrix} 1 & m_1(x) & m_2(x) \\ m_1(x) & m_2(x) & m_3(x) \\ m_2(x) & m_3(x) & m_4(x) \end{pmatrix}$$

debe ser semidefinida positiva. Esta restricción se cumple si se satisfacen las siguientes desigualdades

$$\begin{aligned} m_2(x) &\geq m_1(x)^2 \\ m_4(x) &\geq m_3(x)^2 \\ m_3(x)m_4(x) &\geq m_3(x)^2 \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$m_3(x)m_4(x) + 2m_1(x)m_3(x)m_3(x) - m_3(x)^3 - m_3(x)^2 - m_1(x)^2m_4(x) \geq 0$$

que involucran los subdeterminantes principales de $H(x)$. Por último, debemos minimizar el funcional:

$$J(m) = \int_0^1 \left[1 - 2m_2(x) + m_4(x) + \left(\int_0^x m_1(s) ds \right)^2 \right] dx \quad (3.61)$$

bajo las restricciones (3.60) y la condición de frontera

$$\int_0^1 m_1(s) ds = 0 \quad (3.62)$$

El problema (3.61) lo llevamos a una versión discreta tomando una malla de puntos sobre el dominio $0 \leq x \leq 1$. Para este caso tomaremos 10 puntos igualmente espaciados

$$x_i = \frac{i}{10} \quad i = 1, 2, \dots, 10$$

y escribimos el funcional (3.61) en una forma discreta:

$$J_d(m) = \sum_{i=1}^{10} \left[1 - 2m_2(x_i) + m_4(x_i) + \left(\sum_{j=1}^i m_1(x_j) \Delta x_j \right)^2 \right] \Delta x_i \quad (3.63)$$

donde

$$\Delta x_j = \Delta x_i = \frac{1}{10}.$$

Además las restricciones (3.60) se deben imponer sobre cada punto x_i en la malla. Finalmente representamos la condición de frontera (3.62) como

$$\sum_{i=1}^{10} m_1(x_i) \Delta x_i = 0 \quad (3.64)$$

De esta manera tenemos un planteamiento discreto del problema original el cual consiste en minimizar (3.63) bajo las restricciones, discretas, (3.60) y la condición de frontera (3.64). Este problema de optimización presenta las siguientes características:

1. Es un problema donde debemos encontrar 40 variables $m_k(x_i)$ con $k = 1, 2, 3, 4$ e $i = 1, 2, \dots, 10$.
2. La función objetivo J_d es convexa en las variables $m_k(x_i)$.
3. El problema incluye 40 restricciones en forma de desigualdades no lineales (3.60) y una restricción lineal (3.64).
4. El conjunto factible para el problema es convexo debido a que las desigualdades (3.60) caracterizan las entradas de una matriz de Hankel semi-definida positiva.

Para resolver este problema empleamos rutinas especializadas de optimización. Es importante resaltar que podemos utilizar diferentes tipos de búsqueda dado que tratamos con un problema de optimización de naturaleza convexa. Este hecho garantiza que, en principio, el algoritmo convergerá a la solución sin detenerse en mínimos locales.

El algoritmo de búsqueda nos proporciona los valores óptimos $m_k^*(x_i)$ que llamamos *momentos óptimos* y que hemos dibujado en la Fig. 3.3. Dentro de cada recuadro se han dibujado 10 valores óptimos $m_k^*(x_i)$ donde $i = 1, 2, \dots, 10$. Estos 40 valores contienen la información necesaria para resolver el problema generalizado correspondiente:

$$\min_{\nu} \tilde{J}(\nu) = \int_0^1 \left[\int_{\mathbf{R}} (1 - \lambda^3)^3 d\mu_x(\lambda) + \left(\int_0^x \int_{\mathbf{R}} \lambda d\mu_s(\lambda) ds \right)^3 \right] dx \quad (3.65)$$

bajo la restricción

$$\int_0^1 \int_{\mathbf{R}} d\mu_x(\lambda) dx = 0 \quad (3.66)$$

A partir de los momentos óptimos obtenidos y empleando las formulas (3.35) y (3.36) podemos determinar la medida parametrizada óptima discreta μ_x^* , para cada punto x_i . Debido al teorema de Caratheodory cada medida óptima está soportada en dos puntos como máximo.

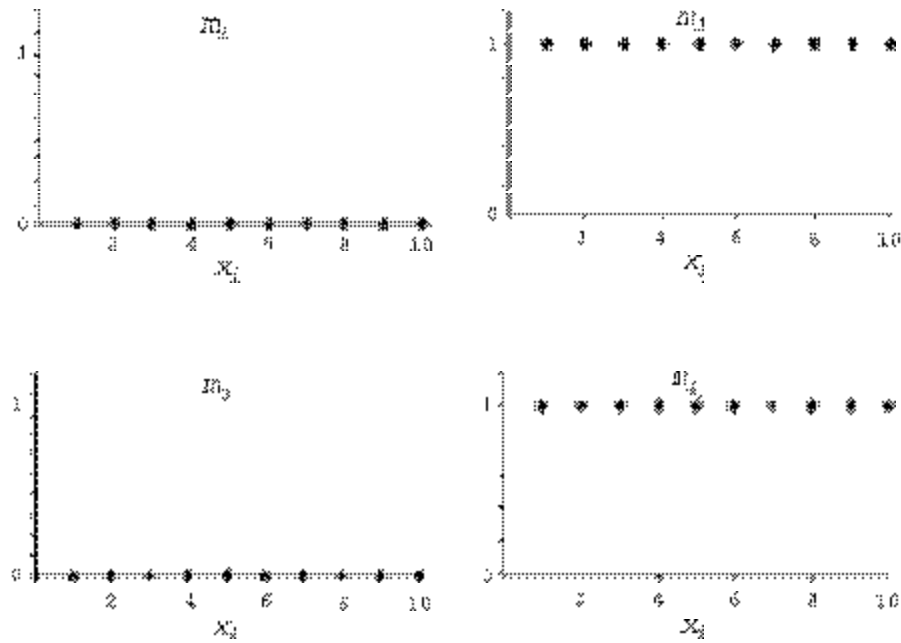


Figura 3.3: Gráficas de los 40 valores óptimos $m_k^*(x_i)$ para el problema de Bolza.

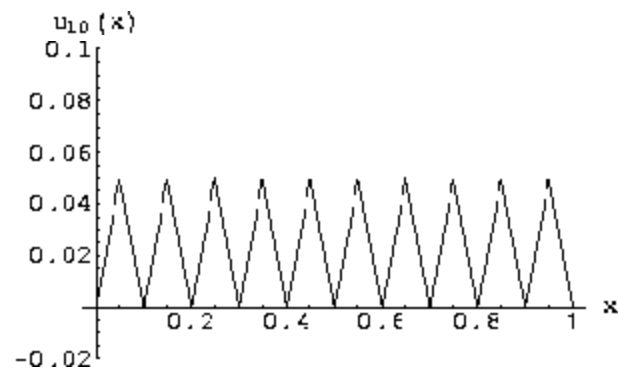


Figura 3.4: Sucesiones minimizantes para el problema de Bolza.

La solución obtenida numéricamente tiene la forma

$$\mu_{x_i}^* = \frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1, \quad i = 1, 2, \dots, 10.$$

Esto significa que el funcional (3.57) bajo las condiciones de frontera (3.58) carece de minimizadores, además sus sucesiones minimizantes mostrarán una oscilación persistente sobre todo el dominio $0 \leq r \leq 1$ debido a que las derivadas de sus términos u_n alternarán entre los valores ± 1 , en proporciones iguales, cuando $n \rightarrow \infty$. Estas sucesiones se muestran en la figura 3.4.

Cerramos este capítulo haciéndole notar al lector que el método de relajaciones semidefinidas presentado anteriormente nos permite transformar un problema variacional no convexo en un programa matemático definido en términos de desigualdades matriciales, al cual llamaremos relajación semidefinida del problema original. La ventaja de esta transformación está en que el problema matemático al que se llega siempre tiene una solución y de esta solución podemos inferir si nuestro problema original tiene solución o no y en cualquiera de los dos casos podemos obtener información importante sobre la solución o las sucesiones minimizantes. En el siguiente capítulo utilizaremos este método basado en relajaciones semidefinidas para encontrar el balance de energías que determinan la microestructura en el material. Nuestro objetivo es encontrar la microestructura que presenta un acero particular bajo condiciones de carga que lo llevan a los regímenes de comportamiento no lineales.

Es interesante notar que este procedimiento, salvo dificultades numéricas y algebraicas, puede aplicarse para obtener la microestructura subyacente en modelos variacionales bidimensionales, a través de un cuidadoso análisis de envolturas convexas de polinomios bidimensionales. Abordaremos este tema en el Capítulo 5.

Capítulo 4

Cálculo de una Microestructura Unidimensional

En este capítulo pondremos en práctica los desarrollos teóricos de los capítulos 2 y 3 para plantear y analizar el comportamiento de la microestructura de una probeta de acero, con bajo contenido de carbono, que se encuentra sometida a las cargas proporcionadas por una máquina universal más allá del régimen elástico. En una barra de estas características se observan cambios en su microestructura dependiendo de las condiciones que le imponga dicha máquina [26, 40]; en particular la transformación martensítica que se describió en la sección 2.2.2. Esta transformación se debe ver reflejada en la existencia de dos posibles configuraciones energéticas que el material puede escoger. En otras palabras, el potencial de energía de la barra debe presentar dos mínimos; estos mínimos representan dos configuraciones energéticas (celdas de red) distintas que puede escoger el material.

El procedimiento que utilizamos para tratar el balance de energía (3.5) con el potencial (3.7), vía el método de los momentos (sección 3.2), nos permite concluir que para poder minimizar el balance energético debemos escoger no una entre las dos estructuras posibles sino proporciones distintas de las dos. En otras palabras: el material minimiza su energía interna no escogiendo una de las dos estructuras sino proporciones de las dos estructuras posibles.

La organización del capítulo es la siguiente: primero determinamos la no convexidad de (3.7), calculamos su envolvente convexa y hacemos un estudio del comportamiento del material a partir de la figura 4.1. Una vez hecho un análisis preliminar del comportamiento del material planteamos el problema variacional utilizando el método de los momentos para obtener su correspondiente relajación semidefinida. Finalmente interpretamos los resultados obtenidos en términos de las consideraciones física hechas en el Capítulo 2.

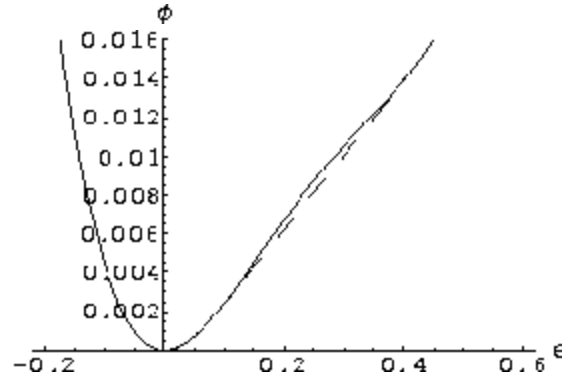


Figura 4.1: Gráfica de $\phi(\epsilon)$ Vs. ϵ (línea sólida) y su envoltura convexa (línea punteada). El polinomio ha sido normalizado para utilizar la ecuación (3.53) directamente.

4.1. Envoltente convexa del potencial de deformación

Podemos utilizar la formula (3.53) para confirmar la no convexidad y calcular la envoltente convexa del polinomio. Según esta ecuación $3a_3^2 - 8a_2 \geq 0$ para que (3.8) no sea convexo. Si tomamos $a_3 = -1,00381$ y $a_2 = 0,328166$ (coeficientes de ϕ normalizados para que el termino que multiplica a ϵ^4 sea igual a 1) es fácil ver que $3a_3^2 - 8a_2 = 0,397576 \geq 0$, lo que confirma la no convexidad del polinomio. También podemos encontrar los puntos $t_{1,3}$ de la ecuación (3.52) (los límites de la región convexa):

$$\begin{aligned}
 t_{1,3} &= -\frac{a_3}{4} \pm \frac{1}{4}\sqrt{3a_3^2 - 8a_2} \\
 t_1 &= 0,0933185 \\
 t_3 &= 0,408587
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

Es claro de la gráfica para ϕ (figura 4.1) que éste permite dos configuraciones energéticas para la muestra que está bajo estudio, cuando la deformación es baja (y por lo tanto el estrés al que esta está sometida también lo es) la muestra se mantendrá, principalmente, en el nivel de energía correspondiente a $\epsilon < 0,3$. Este intervalo, según las figuras 2.20 y 3.1, comprende buena parte de la curva y está apenas adentrándose en la región del endurecimiento por deformación. Pasado el estrés máximo que soporta el material éste debe empezar a presentar una configuración de energía más alta en su estructura microscópica para poder endurecerse, esta configuración la asociamos con la pequeña caída de potencial que se observa cerca de $\epsilon \approx 0,4$.

El comportamiento que deberíamos esperar, respecto a la microestructura

del material, depende del valor que tome ϵ , para deformaciones pequeñas esperamos que el material contenga una alta concentración de configuración de baja energía, mientras que para ϵ cercanos al punto de fractura lo esperado sería una alta concentración de microestructura con mayor energía (causante del endurecimiento por deformación).

En el caso de forzar al material a tener un ϵ que esté en la región de no convexidad ($0,0933185 < \epsilon < 0,408587$) esperaríamos que el material escoja una combinación de los dos niveles de energía que le permitan minimizar su energía de acuerdo con lo impuesto en el balance de energía de la ecuación 3.5. Para confirmar estas suposiciones procedemos a plantear el siguiente problema variacional: minimizar

$$E(\epsilon) = \int_0^L \phi(\epsilon) + |u(x)|^2 dx \quad (4.2)$$

sujeta a las condiciones de frontera

$$\epsilon(0) = 0, \quad \epsilon(L) = 0,25. \quad (4.3)$$

Una vez planteado el problema variacional podemos pasar a tratarlo con el método de los momentos descrito en la sección 3.2.

4.2. Solución del problema

Este problema lo podemos tratar con los métodos de la sección 3.2.1 ya que cumple con todos los requisitos necesarios. La versión discreta del problema como relajación semidefinida se puede escribir como:

$$\begin{aligned} \min_{m(x_i)} E(m(x_i)) = \\ \sum_{i=1}^N \left(c_2 m_2(x_i) + c_3 m_3(x_i) + c_4 m_4(x_i) + \left| a_0 + \sum_{j=1}^i m_1(x_j) \Delta x_j \right| \right) \Delta x_i \end{aligned} \quad (4.4)$$

sujeto a

$$\sum_{i=1}^N m_1(x_i) \Delta x_i = a_1 - a_0, \quad (4.5)$$

y a que la matriz de Hankel de los momentos

$$H(x_i) = \begin{pmatrix} 1 & m_1(x_i) & m_2(x_i) \\ m_1(x_i) & m_2(x_i) & m_3(x_i) \\ m_2(x_i) & m_3(x_i) & m_4(x_i) \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

sea definida positiva. En estas ecuaciones N es el número de puntos en el que dividimos el intervalo $[0, L]$, $\Delta x_i = \frac{1}{N}$, $c_2 = 508,319$, $c_3 = -1554,87$ y $c_4 = 1548,97$. Procedemos a presentar los resultados que se obtienen al resolver el problema de optimización (4.4)-(4.6).

	$m_1(x_i)$	$m_2(x_i)$	$m_3(x_i)$	$m_4(x_i)$
x_1	0.0970171	0.0110555	0.00189916	0.000538452
x_2	0.0977761	0.0113862	0.00203169	0.000591956
x_3	0.0986907	0.011795	0.00219744	0.00065915
x_4	0.0998299	0.0123164	0.00241114	0.000746114
x_5	0.101311	0.0130092	0.00269779	0.000863156
x_6	0.103348	0.0139812	0.00310337	0.00102924
x_7	0.106386	0.0154553	0.00372275	0.0012835
x_8	0.111507	0.0179752	0.00478765	0.00172149
x_9	0.122221	0.0233024	0.00704833	0.00265264
x_{10}	0.158804	0.0416153	0.0148407	0.00586521
x_{11}	0.328993	0.127028	0.0512269	0.0208744
x_{12}	0.377028	0.151184	0.0615394	0.0251375
x_{13}	0.389377	0.157432	0.0642251	0.0262557
x_{14}	0.395003	0.160306	0.0654741	0.0267814
x_{15}	0.398259	0.161991	0.0662163	0.0270982
x_{16}	0.40041	0.163121	0.0667223	0.0273176
x_{17}	0.401957	0.163948	0.0670991	0.0274837
x_{18}	0.403139	0.164592	0.0673977	0.0276176
x_{19}	0.404082	0.165115	0.0676452	0.0277304
x_{20}	0.404861	0.165557	0.0678577	0.0278287

Cuadro 4.1: Momentos óptimos para el problema (4.4)-(4.6).

Para encontrar los valores de los momentos $m_j(x_i)$, $j = 1, 2, 3, 4$, del problema (4.4)-(4.6) utilizamos el software de optimización AMPL [12]. El solucionador utilizado para tratar este problema fue *KNITROTM*, un solucionador para problemas de optimización no lineal que utiliza un algoritmo de tipo interior (o de barrera).

Este programa encuentra los valores dados en el cuadro 4.1 para los momentos óptimos, con estos momentos podemos reconstruir la medida de probabilidad μ_i para cada punto siguiendo los pasos descritos en la sección 3.2. Es claro que nos encontramos ante un caso en el que la medida de probabilidad tiene un soporte doble ya que $m_2^*(x_i) < (m_1^*(x_i))^2$. Para encontrar los soportes y pesos correspondientes utilizamos las ecuación (3.35)-(3.36), estas cantidades están calculadas en el cuadro 4.2. En este caso particular los soportes $(t_{1,2})$ están relacionados con los dos posibles niveles de energía estables que se observan en el potencial de deformación de la figura 4.1, note que los dos soportes mantienen el mismo valor para todos los puntos de la malla y que $t_1(x_i) < t_2(x_i)$. El peso $\lambda_1(x_i)$ nos indica la proporción del material, que bajo una deformación x_i , escoge la configuración energética correspondiente a $t_1(x_i)$. Es claro de el cuadro 4.2 y de la figura 4.2, que entre más se deforme el material mayor será la proporción del material que escoja el estado de energía más alto. También es claro que a medida que aumenta la deformación las proporciones entre los estados

	$\lambda_1(x_i)$	$t_1(x_i)$	$\lambda_3(x_i)$	$t_3(x_i)$
x_1	0.983633	0.0917882	0.0163674	0.411261
x_2	0.981727	0.0919461	0.0182733	0.410992
x_3	0.979329	0.0921044	0.0206714	0.410723
x_4	0.976219	0.0922632	0.0237806	0.410453
x_5	0.972029	0.0924224	0.0279715	0.410183
x_6	0.966074	0.0925822	0.0339263	0.409912
x_7	0.956948	0.0927424	0.0430523	0.40964
x_8	0.941213	0.0929031	0.0587868	0.409368
x_9	0.907741	0.0930643	0.0922591	0.409097
x_{10}	0.792216	0.093226	0.207784	0.408834
x_{11}	0.252903	0.0933882	0.747097	0.408749
x_{12}	0.101053	0.0935494	0.898947	0.408895
x_{13}	0.0623951	0.093709	0.937605	0.409053
x_{14}	0.0450579	0.0938669	0.954942	0.409212
x_{15}	0.0352382	0.0940234	0.964762	0.409371
x_{16}	0.0289219	0.0941782	0.971078	0.409531
x_{17}	0.024519	0.0943315	0.975481	0.40969
x_{18}	0.021275	0.0944833	0.978725	0.409848
x_{19}	0.0187856	0.0946336	0.981214	0.410006
x_{20}	0.0168151	0.0947824	0.983185	0.410164

Cuadro 4.2: Proporciones de los pesos ($\lambda_{1,3}$) y puntos de soporte ($t_{1,3}$) de la medida de probabilidad μ_i .

energéticos cambia.

Una posible interpretación de este resultado se encuentra en [38] donde se propone asociar cada uno de los estados energéticos con una fase sólida distinta del material. Si interpretamos cada estado energético como una fase del material se observa claramente de el cuadro 4.2 que, en efecto, hay una coexistencia de dos fases distintas y que la proporción en que cada una de estas se manifiesta cambia cuando el material es sometido a alguna deformación específica. Al llegar a la deformación máxima la gran mayoría de este material habrá cambiado de fase sólida. Esto es consistente con la transformación martensítica que se describe en la sección 2.2.2.

Otra posible interpretación puede darse, no en términos de cambios de fase, sino en términos de aumento de imperfecciones en el material. Es bien conocido que las imperfecciones (dislocaciones, cambios de grano, etc.) aumentan la energía elástica del material y lo hacen más resistente. De hecho una de las técnicas para el endurecimiento del acero es el aumento de la cantidad de dislocaciones presentes en este. No está fuera de contexto proponer que la deformación del material introduce o multiplica la cantidad de defectos dentro de éste, viéndose esto reflejado macroscópicamente como un endurecimiento de la muestra. En este caso la configuración energética alta estaría asociada a una im-

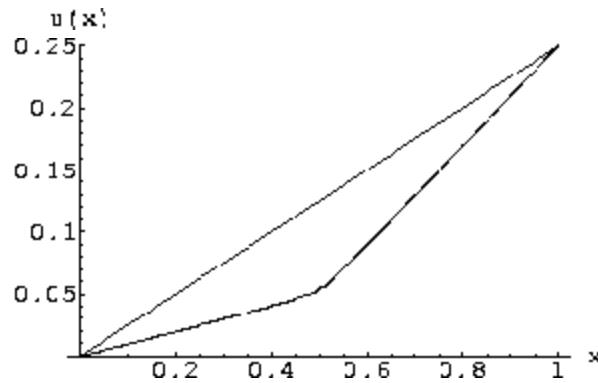


Figura 4.2: $u(x)$ Vs. x . La línea recta representa un posible valor de la función $u(x)$ que cumple las condiciones de contorno ($u(0) = 0$ y $u(1) = 0,25$), mientras que la línea de abajo muestra la recuperación de la solución a partir de los datos de el cuadro 4.2.

perfección particular (o combinación de varias) mientras que la pequeña sería la correspondiente a la celda original que lo compone. Interpretando los resultados de esta manera vemos que a mayor deformación habría una mayor proporción de imperfecciones Vs. celdas básicas

Por último, en la figura 4.2 mostramos la recuperación de $u(x)$ a partir de los datos de el cuadro 4.2. Adicionalmente se ha graficado la recta $u(x) = 0,25x$ que es una posible solución del problema. En esta figura se nota que la alternancia en las pendientes de u describen un comportamiento distinto al de la solución $u(x) = 0,25x$.

Es importante resaltar que el comportamiento oscilatorio que aparece en el cuadro 4.2 muestra el balance energético que debe tomar la microestructura de una barra sometida a las condiciones de carga mencionadas cuyo material constitutivo tenga un potencial de energía de deformación como el que hemos tratado en este capítulo.

Capítulo 5

Análisis de Envolturas Convexas Para Polinomios Bidimensionales

En este capítulo se describirá el análisis de la envoltura convexa de polinomios en dos variables $f(x, y)$ (cuyo comportamiento puede ser no convexo), a partir de los momentos bidimensionales asociados a una distribución de probabilidad soportada en el plano que representa una combinación convexa asociada con la gráfica de f . Finalmente mostraremos cómo, a partir de los momentos óptimos encontrados como solución a un programa matemático, se puede extraer la información de la medida de probabilidad que define la envoltura convexa como indica la expresión (6). Este objetivo lo lograremos a través de programas semidefinidos que representan los momentos de una distribución de probabilidad bivariada en sus variables de diseño.

Este problema tiene como propósito final abordar el análisis de problemas variacionales no convexos con aplicaciones a elasticidad no lineal. El tratamiento presentado proporciona información explícita para problemas de dos dimensiones y además presenta una manera posible de construir la medida óptima a partir de sus momentos. Esta construcción de la medida óptima en un problema de elasticidad, representa la información correspondiente a la distribución de las microestructuras que aparecen en placas compuestas de aleaciones particulares como describimos previamente en (6). El potencial de energía de deformación de estas placas es, comunmente, una función no convexa en dos dimensiones.

Es de nuestro interés estimar la envoltura convexa f_c y la medida óptima del problema de optimización en medidas, que define la envoltura convexa en cada punto, cuando $f(x, y)$ es un polinomio en dos variables. Empezaremos describiendo cómo se calcula la envoltura convexa y por último se mostrará el cálculo de la medida óptima mediante un cuidadoso procedimiento algebraico.

5.1. Caracterización del problema

Supongamos un polinomio bidimensional $f(x, y)$ está dado por la siguiente expresión general

$$f(x, y) = \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j} x^i y^j. \quad (5.1)$$

El teorema de Caratheodory (teorema 1, página 56) establece que cualquier punto en una envoltura convexa de una función coerciva f se puede expresar como una combinación convexa que involucra a $r+1$ puntos, cuando la función está definida en R^r . Por lo tanto se puede definir la envoltura convexa de la función coerciva $f : R^r \rightarrow R$ en el punto t como el siguiente problema de optimización:

$$\min \sum_{k=0}^n \lambda_k f(t_k) \quad (5.2)$$

donde el mínimo contempla todas las combinaciones convexas finitas tales que $\sum_{k=0}^n \lambda_k t_k = t$. Además sabemos que la combinación convexa que logra el óptimo en (5.2) está compuesta por $r+1$ puntos a lo sumo.

Este resultado permite incorporar el concepto de distribución de probabilidad en el estudio ya que cada combinación convexa $\lambda_1 t_1 + \dots + \lambda_n t_n$ puede identificarse con una distribución de probabilidad discreta soportada en los puntos $t_1, \dots, t_n$ con pesos $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ respectivamente. La combinación convexa

$$\lambda_1 t_1 + \dots + \lambda_n t_n \quad (5.3)$$

puede representarse en forma concisa como la medida de probabilidad

$$\mu = \sum_{i=0}^n \lambda_i \delta_{t_i} \quad (5.4)$$

donde δ_{t_i} es la medida de Dirac soportada en el punto t_i .

Por lo tanto, encontrar la envoltura convexa de f en un punto específico (a, b) admite una representación como un problema de optimización

$$f_c(a, b) = \min_{\mu} \int f(\lambda) d\mu(\lambda) \quad (5.5)$$

donde μ representa la familia de medidas de probabilidad en el plano con momentos de primer orden iguales a los valores a y b respectivamente. Por lo tanto el problema de hallar la envoltura convexa toma la forma siguiente:

$$f_c(a, b) = \min_m \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j} m_{i,j} \quad (5.6)$$

donde los $m_{i,j}$ son los momentos bidimensionales de una medida de probabilidad μ en el plano.

Para abordar el problema de caracterización de momentos bidimensionales se utilizan algunos resultados que permiten plantear el problema de optimización

(5.6) como un programa semidefinido [9, 21]. Así, el problema en medidas (5.5) toma la forma de un *programa semidefinido*, porque la condición para que los valores $m_{i,j}$ sean momentos bivariados es que la forma cuadrática

$$(m_{i+i',j+j'} : 0 \leq i+j \leq n; 0 \leq i'+j' \leq n) \quad (5.7)$$

sea semidefinida positiva. Esta familia de problemas se ha estudiado con profundidad durante los últimos años y por lo tanto disponemos de software comercial para tratarlos [14, 41]. Abordaremos este punto en el Capítulo 11.

A continuación explicaremos brevemente y en forma simplificada algunas condiciones que deben cumplir los momentos bidimensionales. Posteriormente utilizaremos estas condiciones para estimar la envoltura convexa de superficies polinomiales. Daremos, finalmente, unos ejemplos específicos.

5.2. Implementación del problema

Teniendo en cuenta que al polinomio bidimensionaleal (5.1), en el punto t , le corresponde una distribución de probabilidad óptima con momentos algebraicos bidimensionales $m_{i,j}$, que resuelven el programa matemático (5.6). Donde $m_{i,j}$ es el momento asociado a la función $x^i y^j$ de la medida μ :

$$m_{i,j} = \int x^i y^j d\mu(x, y). \quad (5.8)$$

Podemos expresar el análisis de una envoltura convexa como la minimización de la combinación lineal en (5.6) y la reconstrucción de la medida óptima μ^* a partir de los valores óptimos $m_{i,j}^*$.

La restricción sobre el programa matemático (5.6), para que éste sea un problema sobre momentos, consiste en garantizar que la matriz m esté compuesta por momentos. Luego, debemos ser capaces de caracterizarlos apropiadamente. Para ello emplearemos matrices

$$m = (m_{i+i',j+j'} : 0 \leq i+j \leq n; 0 \leq i'+j' \leq n) \quad (5.9)$$

denominadas matrices de restricción. Para que m cumpla los requisitos mencionados debe ser semidefinida positiva y tener una forma particular en su estructura interna [9, 21]. Explicaremos la forma para obtener la matriz de restricción m :

1. Se crea una tabla cuya primera fila contiene a las funciones $x^i y^j$ donde $0 \leq i+j \leq n$.
2. De igual manera se ubican los mismos términos de la primera fila en la primera columna de la tabla de manera vertical (en el mismo orden).
3. Para completar todas las entradas en el interior de la tabla, se realiza la multiplicación entre cada elemento de la primera fila y cada elemento de la primera columna.

4. Finalmente cada función obtenida se cambia por su momento bidimensional correspondiente

$$x^n y^r \longrightarrow m_{nr} \quad (5.10)$$

Este paso equivale a calcular los elementos matriciales de m .

De esta manera se encuentra la forma interna de la matriz semidefinida de restricción, su estructura y su definición positiva garantizan que se trata de una matriz de momentos bidimensionales [9, 18, 19, 20, 21].

Ejemplo

Analizamos ahora el caso particular de un polinomio general de cuarto orden (bidimensional). El cuadro 5.1 muestra la matriz m con las funciones obtenidas según los pasos 1,2 y 3 descritos en la sección anterior.

	1	x	y	x^2	xy	y^2
1	1	x	y	x^2	xy	y^2
x	x	x^2	xy	x^3	x^2y	xy^2
y	y	xy	y^2	x^2y	xy^2	y^3
x^2	x^2	x^3	x^2y	x^4	x^3y	x^2y^2
xy	xy	x^2y	xy^2	x^3y	x^2y^2	xy^3
y^2	y^2	xy^2	y^3	x^2y^2	xy^3	y^4

Cuadro 5.1: Tabla de funciones para restricción.

Al convertir los diferentes términos que aparecen en la matriz anterior en sus respectivos momentos, obtenemos la forma deseada para una matriz de restricción. Recordemos además que esta debe ser semidefinida positiva. La matriz que emplearemos para calcular envolturas convexas de polinomios de grado cuatro es:

$$\begin{bmatrix} m_{00} & m_{10} & m_{01} & m_{20} & m_{11} & m_{02} \\ m_{10} & m_{20} & m_{11} & m_{30} & m_{21} & m_{12} \\ m_{01} & m_{11} & m_{02} & m_{21} & m_{12} & m_{03} \\ m_{20} & m_{30} & m_{21} & m_{40} & m_{31} & m_{22} \\ m_{11} & m_{21} & m_{12} & m_{31} & m_{22} & m_{13} \\ m_{02} & m_{12} & m_{03} & m_{22} & m_{13} & m_{04} \end{bmatrix} \quad (5.11)$$

Por lo tanto el problema de minimización de acuerdo al programa (5.6), para encontrar la envoltura convexa de un polinomio como el que aparece en (5.1), se

puede plantear de la siguiente manera para el caso particular de cuarto orden:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} \quad \sum_{0 \leq i+j \leq 4} c_{i,j} m_{i,j} \\ & \text{sujeto a:} \quad \begin{bmatrix} m_{00} & m_{10} & m_{01} & m_{20} & m_{11} & m_{02} \\ m_{10} & m_{20} & m_{11} & m_{30} & m_{21} & m_{12} \\ m_{01} & m_{11} & m_{02} & m_{21} & m_{12} & m_{03} \\ m_{20} & m_{30} & m_{21} & m_{40} & m_{31} & m_{22} \\ m_{11} & m_{21} & m_{12} & m_{31} & m_{22} & m_{13} \\ m_{02} & m_{12} & m_{03} & m_{22} & m_{13} & m_{04} \end{bmatrix} \geq 0. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Donde la matriz de restricción debe ser semidefinida positiva y los momentos m_{00} , m_{10} , m_{01} están dados por las condiciones del problema:

- $m_{00} = 1$, debido a que estamos tratando con una distribución de probabilidad.
- $m_{10} = a$
- $m_{01} = b$

$m_{10} = a$ y $m_{01} = b$ porque aplicamos el teorema de Caratheodory en el punto (a, b) del plano para hallar allí la envoltura convexa de f . Notemos que el problema (5.12) tiene la forma estándar de un programa semidefinido.

Es claro entonces, que para cada punto debemos resolver un programa matemático como (5.12). Así podremos estimar la envoltura convexa de un polinomio bidimensional en una región particular del plano. Es conveniente exhibir una separación de la matriz de restricción entre los parámetros y las variables como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} \quad \sum_{0 \leq i+j \leq 4} c_{i,j} m_{i,j} \\ & \text{s.a. :} \quad \begin{bmatrix} 1 & a & b & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & m_{20} & m_{11} & m_{02} \\ 0 & m_{20} & m_{11} & m_{30} & m_{21} & m_{12} \\ 0 & m_{11} & m_{02} & m_{21} & m_{12} & m_{03} \\ m_{20} & m_{30} & m_{21} & m_{40} & m_{31} & m_{22} \\ m_{11} & m_{21} & m_{12} & m_{31} & m_{22} & m_{13} \\ m_{02} & m_{12} & m_{03} & m_{22} & m_{13} & m_{04} \end{bmatrix} \geq 0 \end{aligned} \quad (5.13)$$

El cual corresponde a la forma estándar de un programa semidefinido donde sus restricciones están dadas a partir de una combinación lineal de matrices que debe ser semidefinida positiva (LMI : Linear Matrix Inequality).

La forma general de un programa semidefinido es la siguiente:

$$\begin{aligned} & \min_x \quad cr \\ & \text{s.a.} \quad A(x) = A_0 + r_1 A_1 + \dots + r_N A_N \geq 0. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Donde, $x = (x_1, \dots, x_N)$ es un vector de incógnitas escalares (variables de decisión o variables de diseño). $A_0, \dots, A_N$ son matrices simétricas dadas, y " ≥ 0 " se utiliza para indicar "semidefinido positivo".

Este tipo de restricción es precisamente la que tenemos en el problema (5.13) que define una envoltura convexa. Por lo tanto podemos emplear rutinas comerciales para resolver programas semidefinidos. En este caso utilizamos la toolbox LMI Control de Matlab 6.1[®] [14], volveremos sobre este tema en el Capítulo 11. El algoritmo empleado se muestra a continuación:

```
function fopt = envoltura2D(a,b,c)
%DEFINICIÓN DEL PROBLEMA LMI
%ENTRADAS:
% a: Punto X del plano
% b: Punto y del plano
% c: Coeficientes del vector de función objetivo

%Inicializa toolbox LMI
setlmi([]);
%Matriz de coeficientes constantes
A=[1 a b 0 0 0;a 0 0 0 0 0;b 0 0 0 0 0;0 0 0 0 0 0;0 0 0 0 0 0;0 0
0 0 0 0];
%Matriz de estructura donde el numero indica la
%variable asociada
S=[0 0 0 1 2 3;0 1 2 4 5 6;0 2 3 5 6 8;1 4 5 7 9 10;2 5 6 9 10
11;3 6 8 10 11 12];
%Definición de la variable
[X]=lmivar(3,S);
%Definición de la restricción
lmiterm([-1 1 1 X],1,1); lmiterm([-1 1 1 0],A);
%Almacenamiento del problema
LMIs = getlmi;
%Resolución del problema de optimización
fopt = mincx(LMIs,c);
```

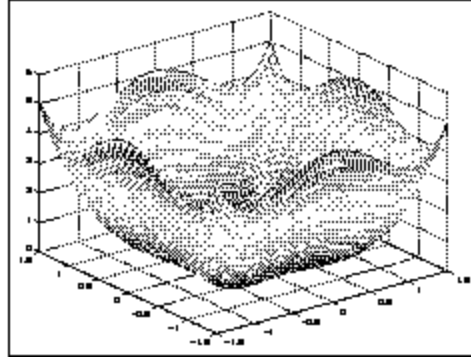
Para ilustrar la eficacia del algoritmo analizamos un polinomio de cuarto orden, como:

$$f(x, y) = (x^4 + y^4 - x^2y^3). \quad (5.15)$$

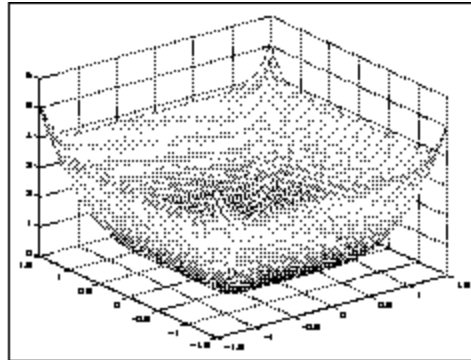
Para hallar la envoltura convexa de esta función utilizamos el programa

matemático:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar} \quad m_{10} + m_{04} - m_{22} \\ &\text{s. a.} \quad \begin{bmatrix} 1 & a & b & 0 & 0 & 0 \\ a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & m_{20} & m_{11} & m_{02} \\ 0 & m_{20} & m_{11} & m_{20} & m_{31} & m_{12} \\ 0 & m_{11} & m_{02} & m_{31} & m_{12} & m_{03} \\ m_{20} & m_{30} & m_{21} & m_{40} & m_{31} & m_{22} \\ m_{11} & m_{31} & m_{12} & m_{31} & m_{22} & m_{13} \\ m_{02} & m_{12} & m_{03} & m_{22} & m_{13} & m_{04} \end{bmatrix} \geq 0 \end{aligned} \quad (5.16)$$



(a) Gráfica de la superficie



(b) Envoltura convexa respectiva

Figura 5.1: Superficie y su envoltura convexa.

La superficie del polinomio original y su envoltura convexa se muestran en las gráficas 5.1(a) y 5.1(b) respectivamente. Para obtener estos resultados se empleó el algoritmo mencionado sobre la región $[-1,5, 1,5]^3$. Esto demuestra que la envoltura convexa de un polinomio bidimensional se puede obtener mediante una cuidadosa aplicación de técnicas de programación convexa.

El paso siguiente es utilizar estos valores óptimos para hallar la medida óptima que define la envoltura convexa de la función con sus soportes y pesos,

de esta forma se logra reconstruir y obtener la combinación convexa que permite expresar a $f_c(a, b)$ en términos de unos puntos sobre la gráfica de f . Esta es la información que determina la microestructura en modelos variacionales para elasticidad.

5.3. Construcción de la medida

Tomando como punto de partida la suposición que los valores

$$m_{i,j}^*, 0 \leq i + j \leq 2n \quad (5.17)$$

conforman los momentos óptimos del programa semidefinido (5.13) procedemos a la construcción de la medida óptima que resuelve el programa (5.5) y contiene la información de la envoltura convexa de f en el punto (a, b) . Con este principio podremos analizar la envoltura convexa, a partir de los momentos óptimos bidimensionales encontrados mediante el procedimiento descrito en la sección anterior, que se resume en la solución del programa matemático (5.16) para un polinomio de cuarto orden.

Es de nuestro interés obtener la medida de un polinomio bidimensional de cuarto grado. A continuación mostramos los pasos a seguir utilizando un análisis basado en los momentos de las distribuciones de probabilidad marginales:

1. Se determinan dos polinomios $P(x)$ y $P(y)$ a partir del determinante de la matriz de Hankel construida con los momentos óptimos de las distribuciones de probabilidades marginales para x e y :

$$P(x) = \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{10}^* & m_{20}^* & m_{30}^* \\ m_{10}^* & m_{20}^* & m_{30}^* & m_{40}^* \\ m_{20}^* & m_{30}^* & m_{40}^* & m_{50}^* \\ 1 & x & x^2 & x^3 \end{vmatrix} \quad (5.18)$$

$$P(y) = \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{01}^* & m_{02}^* & m_{03}^* \\ m_{01}^* & m_{02}^* & m_{03}^* & m_{04}^* \\ m_{02}^* & m_{03}^* & m_{04}^* & m_{05}^* \\ 1 & y & y^2 & y^3 \end{vmatrix}$$

El momento marginal m_{00}^* es igual a 1 puesto que se trata de una distribución de probabilidad, $m_{10}^* = a$, $m_{01}^* = b$ porque aplicamos el teorema de Caratheodory en el punto (a, b) en el cual se necesita reconstruir la medida óptima que determina la envoltura convexa.

2. Se procede a construir el soporte de la medida óptima.

$$\mu^* = \sum_{i=1}^3 \delta_{t_{x_i}, t_{y_i}} \quad (5.19)$$

la cual según el teorema de Caratheodoty debe tener 3 puntos a lo sumo ($i = 1, 2, 3$) puesto que se trata de una superficie bidimensional, por lo tanto establecemos tres procedimientos de acuerdo con los menores principales de las matrices de Hankel en (5.18).

- Caso (i): Se analizan los menores principales más pequeños de cada matriz independientemente (menores de tamaño 2×2).

$$\begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{10}^* \\ m_{10}^* & m_{20}^* \end{vmatrix} = 0 \quad \text{ó} \quad \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{01}^* \\ m_{01}^* & m_{02}^* \end{vmatrix} = 0 \quad (5.20)$$

Dado que los determinantes de estas submatrices son nulos, el soporte coincide con solo un punto $t_x = a$ (Soporte en el eje X) y $t_y = b$ (Soporte en el eje Y), por lo tanto es una zona de convexidad en la función.

- Caso (ii): Se analizan, independientemente, los menores principales de tamaño 3×3 , puesto que los menores principales de tamaño 2×2 son positivos.

$$\begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{10}^* \\ m_{10}^* & m_{20}^* \end{vmatrix} > 0 \quad \text{ó} \quad \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{01}^* \\ m_{01}^* & m_{02}^* \end{vmatrix} > 0 \quad (5.21)$$

$$\begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{10}^* & m_{20}^* \\ m_{10}^* & m_{20}^* & m_{30}^* \\ m_{20}^* & m_{30}^* & m_{40}^* \end{vmatrix} = 0 \quad \text{ó} \quad \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{01}^* & m_{02}^* \\ m_{01}^* & m_{02}^* & m_{03}^* \\ m_{02}^* & m_{03}^* & m_{04}^* \end{vmatrix} = 0 \quad (5.22)$$

Si el determinante de esta submatriz de tamaño 3×3 es nulo, el soporte coincide con dos puntos (t_{x_1}, t_{y_1}) , (t_{x_2}, t_{y_2}) y se determinan hallando las raíces de los polinomios:

$$P(t_x) = \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{10}^* & m_{20}^* \\ m_{10}^* & m_{20}^* & m_{30}^* \\ 1 & t_x & t_x^2 \end{vmatrix} \quad \text{ó} \quad P(t_y) = \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{01}^* & m_{02}^* \\ m_{01}^* & m_{02}^* & m_{03}^* \\ 1 & t_y & t_y^2 \end{vmatrix} \quad (5.23)$$

- Caso (iii): Cuando los menores principales hasta dimensión 3×3 son todos positivos, entonces, en este caso debemos tomar un menor de dimensión 4 que define los siguientes polinomios:

$$P(t_x) = \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{10}^* & m_{20}^* & m_{30}^* \\ m_{10}^* & m_{20}^* & m_{30}^* & m_{40}^* \\ m_{20}^* & m_{30}^* & m_{40}^* & m_{50}^* \\ 1 & t_x & t_x^2 & t_x^3 \end{vmatrix} \quad \text{ó} \quad P(t_y) = \begin{vmatrix} m_{00}^* & m_{01}^* & m_{02}^* & m_{03}^* \\ m_{01}^* & m_{02}^* & m_{03}^* & m_{04}^* \\ m_{02}^* & m_{03}^* & m_{04}^* & m_{05}^* \\ 1 & t_y & t_y^2 & t_y^3 \end{vmatrix} \quad (5.24)$$

En este caso el soporte se halla tomando las raíces de cada polinomio en la expresión (5.24), las cuales son reales y diferentes. Por lo tanto la solución de los x (t_{x_i} donde $i = 0 \dots 3$), tales que $P(t_x) = 0$ coincide con los puntos de soporte en el eje x y la solución de los y (t_{y_i} donde $i = 0 \dots 3$), tales que $P(t_y) = 0$ coincide con los puntos de soporte en el eje y .

3. Por último, obtenemos los pesos de la distribución para reconstruir la medida de probabilidad completamente. Estos pesos representan la combinación convexa que define la envoltura convexa de f en términos de su gráfica. Por lo tanto se pueden asignar a los puntos hallados anteriormente. Ellos se pueden obtener de acuerdo a los determinantes de los menores principales de la matriz de Hankel ilustrados en el caso anterior. Es decir:

- Caso (i): El peso $\mu = 1$ cuando sólo existe un punto de soporte, entonces la probabilidad está concentrada toda en un solo punto. Las distribuciones marginales de la medida óptima están dadas por:

$$\mu_X^* = \delta_{t_X} \quad \mu_Y^* = \delta_{t_Y} \quad (5.25)$$

De tal manera que la medida óptima es una medida de Dirac:

$$\mu^* = \delta_{(t_X, t_Y)} \quad (5.26)$$

- Caso (ii): Los pesos para las distribuciones marginales de la medida óptima se obtienen según la siguiente ecuación:

$$\begin{aligned} \mu_{X1} &= \frac{t_{X2} - a}{t_{X2} - t_{X1}} & \mu_{X2} &= \frac{a - t_{X1}}{t_{X2} - t_{X1}} \\ \mu_{Y1} &= \frac{t_{Y2} - b}{t_{Y2} - t_{Y1}} & \mu_{Y2} &= \frac{b - t_{Y1}}{t_{Y2} - t_{Y1}} \end{aligned} \quad (5.27)$$

Donde (a, b) es el punto donde queremos obtener la medida y $t_{ij}, i = X, Y, j = 1, 2$ son los soportes obtenidos en el caso (ii) del paso anterior como raíces de P en (5.18). La medida óptima está dada por:

$$\mu_X = \mu_{X1}\delta_{t_{X1}} + \mu_{X2}\delta_{t_{X2}} \quad \mu_Y = \mu_{Y1}\delta_{t_{Y1}} + \mu_{Y2}\delta_{t_{Y2}} \quad (5.28)$$

- Caso (iii): Los pesos μ se obtienen resolviendo el sistema de ecuaciones lineales:

$$\begin{bmatrix} m_{10}^* \\ m_{20}^* \\ m_{30}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{X1} & t_{X2} & t_{X3} \\ t_{X1}^2 & t_{X2}^2 & t_{X3}^2 \\ t_{X1}^3 & t_{X2}^3 & t_{X3}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{10} \\ \mu_{20} \\ \mu_{30} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} m_{01}^* \\ m_{02}^* \\ m_{03}^* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{Y1} & t_{Y2} & t_{Y3} \\ t_{Y1}^2 & t_{Y2}^2 & t_{Y3}^2 \\ t_{Y1}^3 & t_{Y2}^3 & t_{Y3}^3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mu_{01} \\ \mu_{02} \\ \mu_{03} \end{bmatrix} \quad (5.29)$$

Por lo tanto, en el caso más general existen tres pesos para cada distribución marginal, que corresponden a los tres puntos de soporte de la medida óptima bivariada en el plano, los cuales se asignan en el mismo orden a cada uno de los soportes marginales.

Generalizando y siguiendo los pasos anteriores podemos construir las distribuciones marginales para cada uno de los ejes de la siguiente manera:

$$\mu_X^* = \sum_{i=1}^k \mu_{i0}^* \delta_{t_{X_i}} t_{X_i}, \quad \mu_Y^* = \sum_{i=1}^k \mu_{0i}^* \delta_{t_{Y_i}} t_{Y_i} \quad (5.30)$$

Donde k es el número de puntos de soporte encontrados, $1 \leq k \leq 3$. De manera que la medida óptima bivariada, que recoge la información sobre la envoltura convexa de f en el punto (a, b) y de aquí la información para la microestructura en un problema variacional de elasticidad, se encuentra como el producto directo de las medidas marginales óptimas de (5.30).

Es decir:

$$\mu^* = \mu_X^* \otimes \mu_Y^* \quad (5.31)$$

Para implementar este algoritmo se utilizó Matlab 6.1[®] como se muestra a continuación:

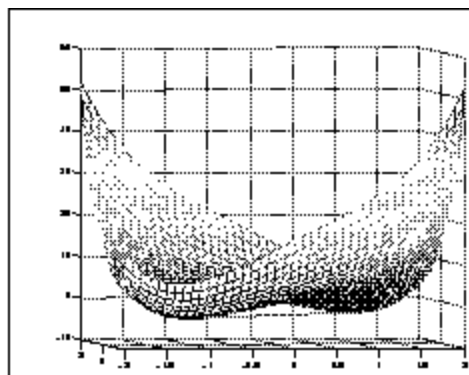
```
function [mu,tx,ty,de]=medidae2D(a,b,cota,Mx,My)
%Entradas:
% a: Punto de prueba para la reconstruccion de la medida en X
% b: Punto de prueba para la reconstruccion de la medida en Y
% cota: Cota de prueba
% Mx: Momentos marginal en X
% My: Momentos marginal en Y
%Salidas:
% mu: Pesos de la medida
% tx: Soporte en x
% ty: Soporte en y
[mux,tx,dex]=soporte(Mx,a,cota);
%Halla soporte y pesos en X
[muy,ty,dey]=soporte(My,b,cota);
%Halla soporte y pesos en Y
[t1,i1] = sort(mux);
[t2,i2] = sort(muy);
mu = [t1;t2];
tx = tx(i1)
ty = ty(i2)
function [mu,t,de]=soporte(mom,a,cota)
%VERIFICACION DE PUNTOS DE SOPORTE
M = [1 a;a mom(1)]; %Primer menor
de(1)=abs(det(M));
if (abs(det(M))<=cota)
%Determinante menor que una cota, solo soportado en un punto
t = a; %Metodo (i)
mu = 1;
else
M = [1 a mom(1);a mom(1) mom(2);mom(1) mom(2) mom(3)];
de(2)=abs(det(M));
if (abs(det(M))<=cota)
[mu,t]=recpuna2(mom,a); %Metodo (ii)
else
[mu,t]=recpun2D(mom,a); %Metodo (iii)
```

```
end
end
```

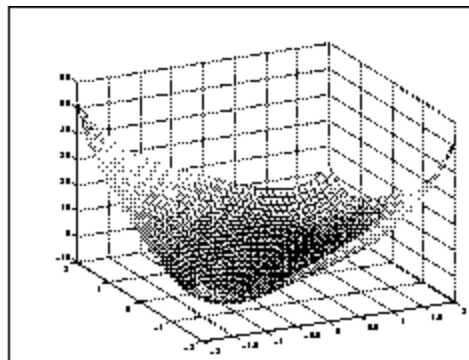
Procedemos a comprobar el algoritmo con algunos polinomios de cuarto orden específicos:

Ejemplo 1

Sea $f(x,y) = x^4 + y^4 - 5xy$, la gráfica 5.2(a) muestra la superficie original, la gráfica 5.2(b) muestra la envoltura convexa calculada con el programa matemático (5.6) y (5.7). Eligiendo el punto $(0,1;0,1)$ la gráfica 5.2(b) muestra la forma en que se descompone la envoltura convexa de f como una combinación de puntos en la gráfica de f . Observe que se pueden visualizar los puntos de soporte unidos por una línea recta.



(a) Superficie respectiva con sus puntos de soporte



(b) Envoltura convexa respectiva con sus puntos de soporte

Figura 5.2: Superficie y su envoltura convexa.

Con el algoritmo de reconstrucción de la medida óptima se obtiene que la

medida en el punto $(0,1;0,1)$ es:

$$\begin{aligned}\mu_X^* &= 0,4553\delta_{-1,1181} + 0,5447\delta_{1,1180} \\ \mu_Y^* &= 0,4553\delta_{-1,1181} + 0,5447\delta_{1,1180}.\end{aligned}\quad (5.32)$$

En este ejemplo vemos que la medida que resuelve la envoltura convexa del polinomio f está dada por dos puntos de soporte en el plano:

$$(x_1, y_1) = (-1,1181; -1,1181) \text{ y } (x_2, y_2) = (1,1180; 1,1180) \quad (5.33)$$

Con probabilidades

$$\lambda_1 = 0,4553 \quad \lambda_2 = 0,5447 \quad (5.34)$$

Esta es la información que nos permite determinar la microestructura en un modelo variacional:

$$\mu^* = \lambda_1\delta_{-1,11;1,11} + \lambda_2\delta_{(1,11;1,11)} \quad (5.35)$$

La figura 5.3 muestra la manera de representar el soporte y su descomposición con los respectivos pesos. Dado el punto $(0,1;0,1)$, el método propuesto

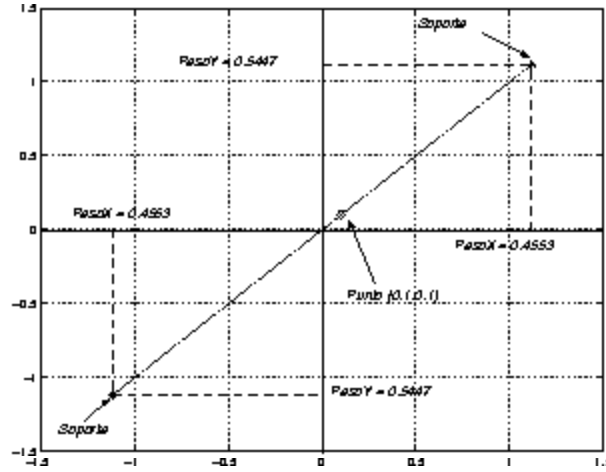


Figura 5.3: Soporte y pesos para el punto $(0,1,0,1)$

busca la medida óptima que resuelve la envoltura convexa, los cuales se reflejan en los puntos de soporte, y sus proyecciones con respecto a cada eje representa la distribución marginal con la cual se asigna este soporte. En este ejemplo la medida óptima (5.35) está soportada en dos puntos.

Ejemplo 2

Ahora consideremos el polinomio

$$f(x, y) = (x^2 + y^2)((x - 1)^2 + (y - 1)^2)((x - 2)^2 + (y + 1)^2).$$

Como ejemplo tomamos el punto $(0,5;0)$. Siguiendo el proceso algebraico explicado anteriormente obtenemos las distribuciones óptimas marginales como se muestra a continuación:

$$\begin{aligned}\mu_X^* &= 0,1667\delta_2 + 0,1667\delta_1 + 0,667\delta_0 \\ \mu_Y^* &= 0,1667\delta_{-1} + 0,1667\delta_1 + 0,667\delta_0\end{aligned}\quad (5.36)$$

Por lo tanto, la medida que resuelve la envoltura convexa f en este punto, tiene los siguientes puntos de soporte:

$$(x_1, y_1) = (2, -1) \quad (x_2, y_2) = (1, 1) \quad (x_3, y_3) = (0, 0) \quad (5.37)$$

con probabilidades:

$$\lambda_1 = 0,1667 \quad \lambda_2 = 0,1667 \quad \lambda_3 = 0,667 \quad (5.38)$$

De esta manera la medida óptima que logra el análisis de la envoltura convexa en el punto $(0,5;0)$ es:

$$\mu^* = \lambda_1\delta_{2,-1} + \lambda_2\delta_{1,1} + \lambda_3\delta_{0,0} \quad (5.39)$$

Las figuras 5.4(a) y 5.4(b) muestran la superficie original y su envoltura convexa junto con los soportes unidos por una línea recta.

La figura 5.5 muestra el soporte y los pesos para este punto. Acá se puede observar que la medida está construida por unos puntos llamados soporte, que se proyectan sobre cada uno de los ejes y cada proyección posee un peso que se interpreta, como la medida de probabilidad marginal de la medida óptima que define la envoltura convexa para un punto. Dado que el punto es $(0,5;0)$ se encuentra más cerca del soporte $(0,0)$, la probabilidad que esté soportada en este punto es mayor que las demás. Notamos que esto tiene sentido porque se trata de una combinación convexa.

Ejemplo 3

Para el polinomio del ejemplo anterior

$$f(x, y) = (x^2 + y^2)((x-1)^2 + (y-1)^2)((x-2)^2 + (y+1)^2).$$

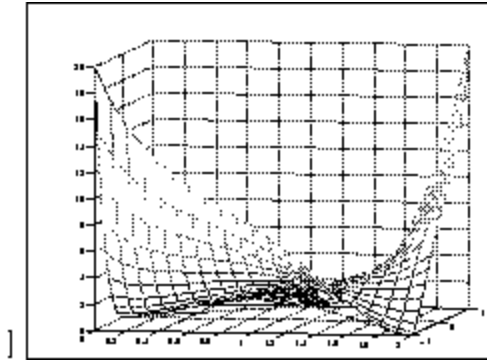
Tomamos otro punto arbitrario: $(2;3)$ y aplicamos en él el procedimiento descrito, obteniendo así las medidas marginales óptimas:

$$\begin{aligned}\mu_X^* &= \delta_2 \\ \mu_Y^* &= \delta_3\end{aligned}\quad (5.40)$$

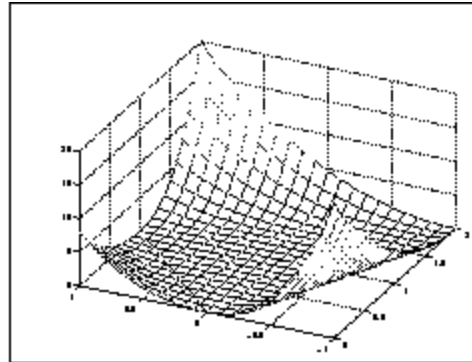
que determinan la medida óptima de Dirac:

$$\mu^* = \delta_{2,3}. \quad (5.41)$$

Lo que quiere decir que la medida estamos en una zona de convexidad de la función. Este caso se muestra para verificar el algoritmo y demostrar que el proceso mencionado es capaz de distinguir entre zonas convexas y no convexas de la función polinómica deseada.



(a) Superficie respectiva con sus puntos de soporte



(b) Envoltura convexa respectiva con sus puntos de soporte

Figura 5.4: Superficie y su envoltura convexa.

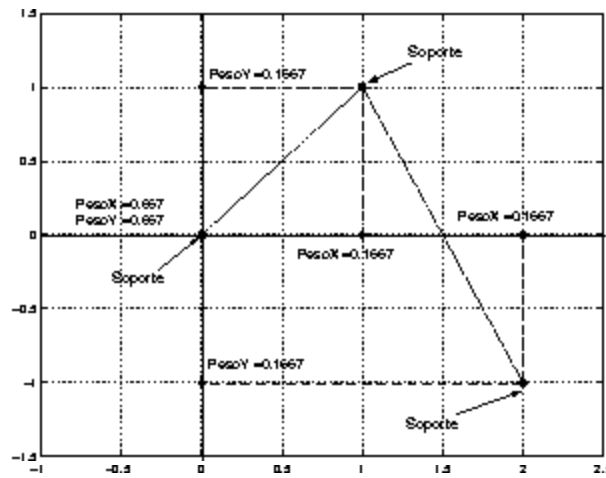


Figura 5.5: Soporte y pesos para el punto $(0,5;0)$

Ejemplo 4

Ahora consideremos el polinomio

$$f(x, y) = x^4 + y^4 - 10xy$$

y calculamos la medida óptima para el punto $(0, 0)$, obtenemos:

$$\begin{aligned}\mu_X^* &= 0,5\delta_{-1,5790} + 0,5\delta_{1,5790} \\ \mu_Y^* &= 0,5\delta_{-1,5790} + 0,5\delta_{1,5790}\end{aligned}\tag{5.42}$$

como sus distribuciones marginales y

$$\mu^* = \frac{1}{2}\delta_{-1,579;-1,579} + \frac{1}{2}\delta_{1,579;1,579}\tag{5.43}$$

que representan la combinación convexa de f en el punto $(0, 0)$.

Las figuras 5.6(a) y 5.6(b) muestran la superficie original y su envoltura convexa junto con los soportes unidos en una línea recta.

La medida que resuelve la envoltura convexa está soportada

$$(x_1, y_1) = (-1,579; -1,579) \text{ y } (x_2, y_2) = (1,579; 1,579)\tag{5.44}$$

con probabilidades de 0,5(50 %) y 0,5(50 %) respectivamente. Para analizar un poco mejor este caso equiprobable, ilustramos la descomposición en la figura 5.7, donde se observa la simetría de la situación.

Ejemplo 5

Para el polinomio

$$f(x, y) = (1 - x^2)^2 + xy + y^2,$$

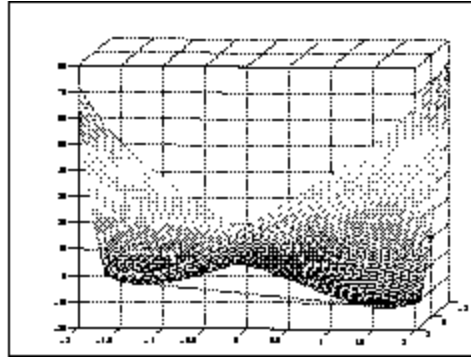
estimamos la medida óptima en el punto $(2; 2)$. Al aplicar el algoritmo implementado se obtienen las distribuciones marginales óptimas:

$$\begin{aligned}\mu_X &= \delta_2 \\ \mu_Y &= \delta_2\end{aligned}\tag{5.45}$$

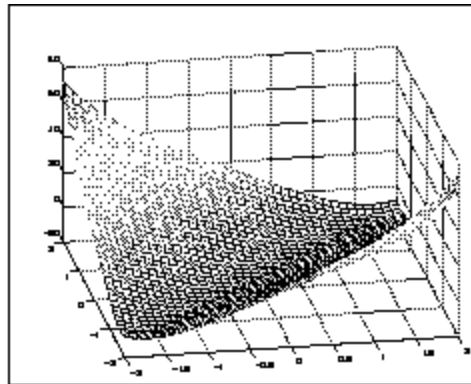
que determinan una medida óptima,

$$\mu^* = \delta_{2;2}\tag{5.46}$$

Lo que significa que el punto pertenece a una zona de convexidad del polinomio, ya que los pesos son unitarios y el soporte se presenta en el punto de prueba.



(a) Superficie respectiva con sus puntos de soporte



(b) Envoltura convexa respectiva con sus puntos de soporte

Figura 5.6: Superficie y su envoltura convexa.

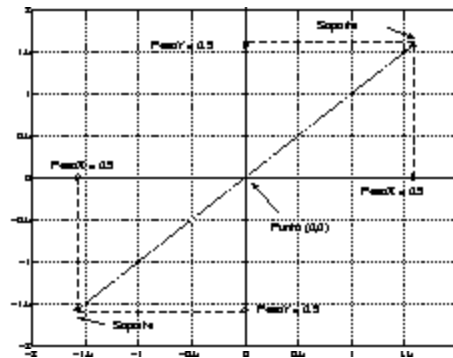


Figura 5.7: Soporte y pesos para el punto (0,0)

Capítulo 6

Problemas Variacionales No Convexos en Dos Dimensiones

En este capítulo aplicamos el método de los momentos a problemas variacionales no convexos utilizados como modelos en elasticidad. Comenzamos expandiendo el método de los momentos descrito en el capítulo 3 para problemas variacionales en una dimensión a su equivalente bidimensional. La expansión al caso bidimensional nos obliga a tomar un nuevo tipo de restricciones sobre el gradiente de la función para poder encontrar soluciones, o sucesiones minimizantes, adecuadas. Estas restricciones incrementan de una manera considerable la complejidad del problema y por lo tanto se deben tratar con cautela; presentamos un esquema simple que incorpora, también, las condiciones de contorno dentro de este nuevo tipo de restricciones.

Trataremos el caso del cálculo de envolventes convexas de superficies no convexas que, como hemos visto en los capítulos anteriores, está íntimamente relacionado con los problemas variacionales. Presentamos una descripción detallada del proceso de discretización que se debe llevar a cabo para transformar un problema variacional a un programa de programación matemática. Para ilustrar el proceso total de discretización utilizamos un problema particular de la forma

$$\iint_{\Omega} \left\{ \left(1 - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + u^2(x, y) \right\} dx dy \quad (6.1)$$

y finalizamos la sección presentando tres casos con condiciones de frontera diferentes. Por último hacemos una síntesis de los resultados del capítulo y aplicamos estos métodos a problemas de elasticidad en placas, en particular al cálculo de microestructuras.

6.1. Método de momentos para superficies

Nos proponemos analizar problemas variacionales no convexos que se puedan expresar de la siguiente forma:

$$\min_u I(u) = \int_{\Omega} f(\vec{\nabla} u(x, y)) \, dx dy \quad (6.2)$$

sujeto a

$$u|_{\partial\Omega} = g \quad (6.3)$$

donde f es una función no convexa y u la familia de todas las funciones admisibles definidas en Ω . Para el caso en que f es convexo ver [1]. Recordamos que para el caso particular de cálculo de microestructuras de materiales f proviene de un potencial no convexo de energía de deformación.

Para analizar esta clase de problemas no convexos utilizamos la formulación de las medidas de Young de la sección 3.2. Debemos introducir, por lo tanto, el funcional generalizado equivalente a $\tilde{I}$ en la ecuación (3.17), con condiciones de contorno apropiadas y la familia de medidas de probabilidad (medidas de Young) soportadas en el plano:

$$\tilde{I}(\nu) = \int_{\Omega} \left(\int_{\mathbb{R}^2} f(s, t) \, d\mu_{x,y}(s, t) \right) \, dx dy \quad (6.4)$$

con

$$\vec{\nabla} u(x, y) = \int_{\mathbb{R}^2} (s, t) \, d\mu_{x,y}(s, t) \quad (6.5)$$

y la condición de contorno (6.3). Aquí

$$\nu = \{\mu_{x,y} : (x, y) \in \Omega\} \quad (6.6)$$

es una familia parametrizada de medidas de probabilidad soportadas en el plano. Cada uno de estos conjuntos ν se conoce como una medida de Young, por lo tanto el funcional generalizado $\tilde{I}$ está definido en la familia de todas las medidas de Young.

La teoría de medidas de Young [4] predice que la función generalizada (6.4) tiene una medida de Young minimizadora $\nu^* = \{\bar{\mu}_{x,y} : (x, y) \in \Omega\}$ que provee información sobre las sucesiones minimizantes del funcional I definido en (6.2). Por lo tanto $\vec{\nabla} u_n(x, y) \rightarrow d\bar{\mu}_{x,y}$ en medida, siempre que u_n sea una sucesión minimizante del funcional I . Además las medidas parametrizadas óptimas $\bar{\mu}_{x,y}$ representan la microestructura del material que es nuestro interés primordial.

De igual forma que en (3.2), el funcional I tiene un minimizador único si y sólo si el funcional generalizado $\tilde{I}$ tiene un minimizador ν^* conformado solamente por medidas de Dirac, que en este caso tienen la forma $\bar{\mu}_{x,y} = \delta_{\vec{\nabla} u(x,y)}$ con ν^* un minimizador para $\tilde{I}$.

En este capítulo trataremos funciones bidimensionales que tengan forma separable

$$f(s, t) = \sum_{i=0}^{3n} a_i s^i + \sum_{j=0}^{3r} b_j t^j \quad (6.7)$$

con $a_{3n}, b_{3n} > 0$. Estas funciones son polinómicas en las derivadas parciales de la función objetivo.

6.2. Envoltentes convexas bidimensionales

Recordemos que para el caso de un polinomio unidimensional es posible definir su envoltente convexa como (ver ecuación (3.40)):

$$f_c(t) = \min_{\mu} \int_{\mathbf{R}} f(\lambda) d\mu(\lambda),$$

donde μ representa la familia de todas las medidas de probabilidad con media t . En este caso cada medida de probabilidad representa una combinación convexa de puntos sobre la recta real. Por lo tanto la medida

$$\bar{\mu} = \lambda_1 \delta_{t_1} + \lambda_2 \delta_{t_2},$$

que soluciona (3.40), representa la combinación convexa que satisface

$$\lambda_1(t_1, f(t_1)) + \lambda_2(t_2, f(t_2)) = (t, f_c(t)).$$

Sabemos que $\bar{\mu}$ está soportada, a lo más, en sólo dos puntos gracias al teorema de Caratheodory de análisis convexo (teorema 1 en la página 56).

En la sección 3.2.2 mostramos que el cálculo de la envoltente convexa para el polinomio f en una dimensión se reduce a resolver el problema semidefinido

$$f_c(t) = c_0 + c_1 t + \min_{m_k} \sum_{k=2}^{3n} c_k m_k$$

sujeto a

$$\begin{pmatrix} 1 & t & m_2 & \cdots & m_n \\ t & m_2 & m_3 & \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 & \vdots & \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ m_n & m_{n+1} & m_{n+2} & \cdots & m_{2n} \end{pmatrix} \succeq 0$$

También mostramos que utilizando el procedimiento algebraico, ((3.35)-(3.37)), podemos obtener la medida óptima a partir de los momentos óptimos que obtenemos de la solución del programa semidefinido (3.31)-(3.32).

Cuando f tiene forma bidimensional separable como aparece en (6.7) su envoltente convexa se define como

$$f_c(s, t) = \min_{\mu} \int_{\mathbf{R}^2} f(\sigma, \gamma) d\mu(\sigma, \gamma), \quad (6.8)$$

donde μ representa la familia de todas las medidas de probabilidad soportadas en el plano que satisfacen

$$(s, t) = \int_{\mathbf{R}^2} (\sigma, \gamma) d\mu(\sigma, \gamma). \quad (6.9)$$

En el caso de polinomios separables podemos utilizar un resultado bien conocido del análisis convexo [1]: *La envolvente convexa de una función separable es la suma de las envolventes convexas de sus componentes.* De este resultado y la explicación de envolturas convexas en una dimensión del capítulo 3 queda claro que la envoltura convexa de f se puede calcular con el programa matemático:

$$f_c(s, t) = a_0 + b_0 + a_1 s + b_1 t + \min_{m_i, p_j} \sum_{i=3}^{3n} a_i m_i + \sum_{j=3}^{3r} b_j p_j \quad (6.10)$$

sujeto a

$$\begin{pmatrix} 1 & s & m_2 & \cdots & m_n \\ s & m_2 & m_3 & \cdots & m_{n+1} \\ m_2 & m_3 & m_4 & \cdots & m_{n+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_n & m_{n+1} & m_{n+2} & \cdots & m_{2n} \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (6.11)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & t & p_3 & \cdots & p_r \\ t & p_3 & p_4 & \cdots & p_{r+1} \\ p_3 & p_4 & p_5 & \cdots & p_{r+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_r & p_{r+1} & p_{r+2} & \cdots & p_{2r} \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (6.12)$$

donde $\succeq 0$ indica que la matriz debe ser definida positiva. Los valores óptimos $\bar{m}_2, \dots, \bar{m}_{2n}, \bar{p}_3, \dots, \bar{p}_{2r}$, que se obtienen de resolver el programa (6.10)-(6.12) permiten determinar la medida óptima $\bar{\mu}$ que satisface (6.8).

Desde un punto de vista práctico, $\bar{\mu}$ es el producto directo de dos distribuciones unidimensionales independientes $\bar{\mu}_S$ y $\bar{\mu}_T$ y por lo tanto tenemos

$$\bar{\mu} = \bar{\mu}_S \otimes \bar{\mu}_T \quad (6.13)$$

donde $\bar{\mu}_S$ representa la envoltura convexa del primer polinomio en (6.7) y $\bar{\mu}_T$ la del segundo polinomio en 6.7. Por lo tanto las distribuciones marginales $\bar{\mu}_S$ y $\bar{\mu}_T$ se obtienen de los valores $s, \bar{m}_2, \bar{m}_3$ y $t, \bar{p}_3, \bar{p}_4$, respectivamente, de la misma forma como se obtiene la distribución para el caso unidimensional. Finalmente es importante notar que la medida óptima $\bar{\mu} = \bar{\mu}_S \otimes \bar{\mu}_T$ determina la combinación convexa que define la envoltura convexa del polinomio separable f en el punto (s, t) y por lo tanto nos brindará la microestructura presente en un modelo de elasticidad.

6.3. Aplicación

Nuestro interés está en estudiar problemas variacionales no convexos como (6.2)-(6.3) cuando f tiene la forma general (6.7). Notamos que la minimización directa del funcional (6.2) nos lleva a un problema de optimización no convexo que puede no ser tratable por algoritmos de minimización estándares, dada la

falta de convexidad de f . Adicionalmente debemos considerar la posibilidad que I no tenga minimizadores en el espacio de funciones admisibles.

Para superar estas dificultades estudiamos el problema generalizado

$$\min_{\nu} \tilde{I}(\nu) = \int_{\Omega} \left(\int_{\mathbb{R}^2} f(s, t) d\mu_{x, y}(s, t) \right) dx dy, \quad (6.14)$$

con

$$\vec{\nabla} u(x, y) = \int_{\mathbb{R}^2} (s, t) d\mu_{x, y}(s, t) \quad (6.15)$$

y la condición de frontera

$$u|_{\partial\Omega} = g \quad (6.16)$$

cuya solución en medidas de Young da información sobre los minimizadores del funcional original I . Utilizando la estructura polinomial separable de f podemos transformar el funcional generalizado (6.14) en el funcional

$$J(m, p) = \int_{\Omega} \left(\sum_{i=0}^{3n} a_i m_i(x, y) + \sum_{j=0}^{3r} b_j p_j(x, y) \right) dx dy, \quad (6.17)$$

donde $m = (m_i(x, y))_{i=0}^{3n}$ y $p = (p_j(x, y))_{j=0}^{3r}$ representan los momentos algebraicos de la medida parametrizada $\mu_{x, y}$ en la medida de Young ν . De esta forma el problema de optimización a solucionar es

$$\min_{m, p} J(m, p) = \int_{\Omega} \left(\sum_{i=0}^{3n} a_i m_i(x, y) + \sum_{j=0}^{3r} b_j p_j(x, y) \right) dx dy, \quad (6.18)$$

con

$$\vec{\nabla} u(x, y) = (m_1(x, y), p_1(x, y)) \quad (6.19)$$

y la condición de frontera (6.16), donde el nuevo conjunto de variables m y p se deben caracterizar como momentos algebraicos de medidas de probabilidad unidimensionales. Para poder imponer esta condición necesitamos que las siguientes matrices

$$\begin{pmatrix} 1 & m_1(x, y) & m_2(x, y) & \cdots & m_n(x, y) \\ m_1(x, y) & m_2(x, y) & m_3(x, y) & \cdots & m_{n+1}(x, y) \\ m_2(x, y) & m_3(x, y) & m_4(x, y) & \cdots & m_{n+2}(x, y) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_n(x, y) & m_{n+1}(x, y) & m_{n+2}(x, y) & \cdots & m_{2n}(x, y) \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (6.20)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & p_1(x, y) & p_2(x, y) & \cdots & p_r(x, y) \\ p_1(x, y) & p_2(x, y) & p_3(x, y) & \cdots & p_{r+1}(x, y) \\ p_2(x, y) & p_3(x, y) & p_4(x, y) & \cdots & p_{r+2}(x, y) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_r(x, y) & p_{r+1}(x, y) & p_{r+2}(x, y) & \cdots & p_{2r}(x, y) \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (6.21)$$

sean semidefinidas positivas para cada punto $(x, y) \in \Omega$. El paso siguiente es discretizar el problema adecuadamente para transformarlo en un programa semidefinido (ver [41, 42] para una introducción a la programación semidefinida).

El primer paso para lograr este objetivo es llevar el problema (6.18)-(6.21) a su versión discreta. Primero tomamos un conjunto finito de N puntos en el dominio Ω bajo un índice k

$$(x_k, y_k) \in \Omega \text{ para } k = 1, \dots, N. \quad (6.22)$$

Seguidamente, para cada punto (x_k, y_k) tomamos los momentos algebraicos

$$(m_i(x_k, y_k))_{i=0}^{2n} \quad p = (p_j(x_k, y_k))_{j=0}^{2r} \quad (6.23)$$

de la respectiva medida parametrizada μ_{x_k, y_k} . Utilizando estas $2N \times (n + r)$ variables de (6.23) podemos expresar el funcional J de una forma discreta

$$J_d(m, p) = \sum_{k=0}^N \left(\sum_{i=0}^{2n} a_i m_i(x_k, y_k) + \sum_{j=0}^{2r} b_j p_j(x_k, y_k) \right) \Delta x \Delta y. \quad (6.24)$$

Las restricciones (6.20) y (6.21) forman un conjunto de desigualdades matriciales lineales para cada punto en Ω , por lo tanto se deben mantener para cada punto (x_k, y_k) de la malla (6.22). Por lo tanto tenemos un conjunto de $2N$ desigualdades matriciales lineales expresadas como

$$[m_{i+j}(x_k, y_k)]_{i,j=0}^n \succeq 0 \quad [p_{i+j}(x_k, y_k)]_{i,j=0}^r \succeq 0 \quad (6.25)$$

donde $m_0 = p_0 = 1$ para todo $k = 1, \dots, N$.

Para poder imponer la restricción (6.19) y la condición de contorno (6.16) debemos ser cuidadosos ya que no toda función vectorial es el gradiente de una función escalar [32]. Para estar seguros que utilizamos las funciones correctas, utilizamos el siguiente hecho: *Dada cualquier curva de Jordan C dentro de la región Ω , la restricción (6.19) implica:*

$$\int_C (m_1 dx + p_1 dy) = u(x_f, y_f) - u(x_0, y_0) \quad (6.26)$$

donde (x_0, y_0) y (x_f, y_f) son los extremos de la curva C .

Escogeremos una colección finita M de curvas C_l , con $l = 1, \dots, M$ que cubrirán todo el dominio Ω . Tomaremos como condición suficiente que cada punto (x_k, y_k) del mallado pertenezca al menos a una curva C_l . Para imponer la condición de frontera (6.16), forzamos toda curva C_l a unir dos puntos de la frontera de Ω . De esta forma obtenemos un conjunto de M restricciones nuevas de la forma:

$$\int_{C_l} (m_1 dx + p_1 dy) = g(x_f^l, y_f^l) - g(x_0^l, y_0^l) \quad (6.27)$$

que se pueden tratar como restricciones lineales en el modelo discreto.

Podemos observar que el problema de optimización (6.18)-(6.19) se puede transformar en un único problema semidefinido después de implementar la discretización. La función objetivo J_d en (6.24) es una función lineal en las variables definidas en (6.23). Estas variables están restringidas por el conjunto de $2N$ desigualdades matriciales (6.25) y el conjunto de M ecuaciones lineales de (6.27).

A diferencia del caso unidimensional (sección 3.2.1) se introduce un nuevo conjunto de condiciones que aseguran la existencia del gradiente de u (restricciones (6.19)). Esta propiedad que deben cumplir los minimizadores de J introduce una cantidad considerable de restricciones que son triviales en la contraparte unidimensional. La complejidad del programa matemático, por lo tanto, aumenta de manera considerable y requiere métodos numéricos que puedan tratar un gran número de restricciones sobre las variables a minimizar, ver capítulos 9, 10 y 11.

Otra dificultad que presenta el conjunto de restricciones (6.19) es la escogencia de las curvas sobre las cuales realizar la integración. Aunque hemos propuesto un conjunto posible, debe ser claro que esta no es la única escogencia viable. El criterio de escogencia que proponemos para el conjunto de curvas está basado en la necesidad de mantener un balance entre mantener el problema con un número de restricciones razonable y mantener estabilidad para obtener aproximaciones numéricas aceptables.

6.4. Resultados

En esta sección presentamos diferentes aplicaciones para calcular minimizadores de problemas variacionales no convexos en dos dimensiones utilizando el método de los momentos. Recordamos que los pasos a seguir que proponemos para encontrar los minimizadores de un problema como (6.2)-(6.3) son los siguientes:

1. Introducir el funcional generalizado (ecuación 6.4) y la condición sobre el gradiente de las funciones solución (ecuación 6.5).
2. Transformar el problema a un problema variacional generalizado sobre el conjunto de medidas de Young en $\mathbb{R}^2$ (ecuaciones (6.18)-(6.19)).
3. Imponer las restricciones para asegurar que las nuevas variables de optimización sean momentos de una distribución de probabilidad (ecuaciones (6.20)-(6.21)) para obtener así una relajación semidefinida.
4. Discretizar el problema tomando una malla finita de N puntos sobre el dominio Ω .
5. Incluir dentro de la restricción para las variables que representan el gradiente (6.19) las condiciones de frontera a través de las integrales de línea (6.27). En este paso unimos las condiciones que hacen a u un gradiente y las condiciones de frontera originales.

6. Resolver el programa matemático resultante.

Para presentar un ejemplo concreto del método proponemos minimizar el funcional

$$\iint_{\Omega} \left\{ \left(1 - \left(\frac{\partial u}{\partial x} \right)^2 \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 + u^2(x, y) \right\} dx dy \quad (6.28)$$

sujeto a a distintas condiciones de frontera de la forma

$$u|_{\partial\Omega} = u_0 \quad (6.29)$$

sobre el dominio $\Omega = [-1, 1]^2$.

El planteamiento generalizado para este problema toma la forma

$$\min_{\nu} \tilde{J}(\nu) = \iiint_{\Omega} \iint_{\mathbb{R}^2} \left\{ (1 - s^2)^2 + t^2 + u^2(x, y) \right\} d\mu_{x,y}(s, t) dx dy, \quad (6.30)$$

donde las medidas parametrizadas $\mu_{x,y}$ cumplen las relaciones

$$\frac{\partial u(x, y)}{\partial x} = \iint_{\mathbb{R}^2} s d\mu_{x,y}(s, t) \quad \frac{\partial u(x, y)}{\partial y} = \iint_{\mathbb{R}^2} t d\mu_{x,y}(s, t) \quad (6.31)$$

equivalentes a (6.15).

La aplicación del método de los momentos sobre (6.30) nos lleva a

$$\min_{m,p} J(m, p) = \iint_{\Omega} \{ 1 - 2m_2(x, y) + m_4(x, y) + p_2(x, y) + u^2(x, y) \} dx dy, \quad (6.32)$$

bajo las restricciones

$$\begin{pmatrix} 1 & m_1(x, y) & m_2(x, y) \\ m_1(x, y) & m_2(x, y) & m_3(x, y) \\ m_2(x, y) & m_3(x, y) & m_4(x, y) \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (6.33)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & p_1(x, y) \\ p_1(x, y) & p_2(x, y) \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (6.34)$$

que aseguran que m y p sean los momentos de una medida de probabilidad. Además las restricciones sobre el gradiente de u

$$u(x, y) = u(x_0, y_0) + \int_C m_1(x, y) dx + p_1(x, y) dy \quad (6.35)$$

que son las restricciones equivalentes a (6.26).

El paso siguiente, según la enumeración hecha al principio de la sección, es plantear una discretización tomando una malla finita sobre el dominio cuadrado

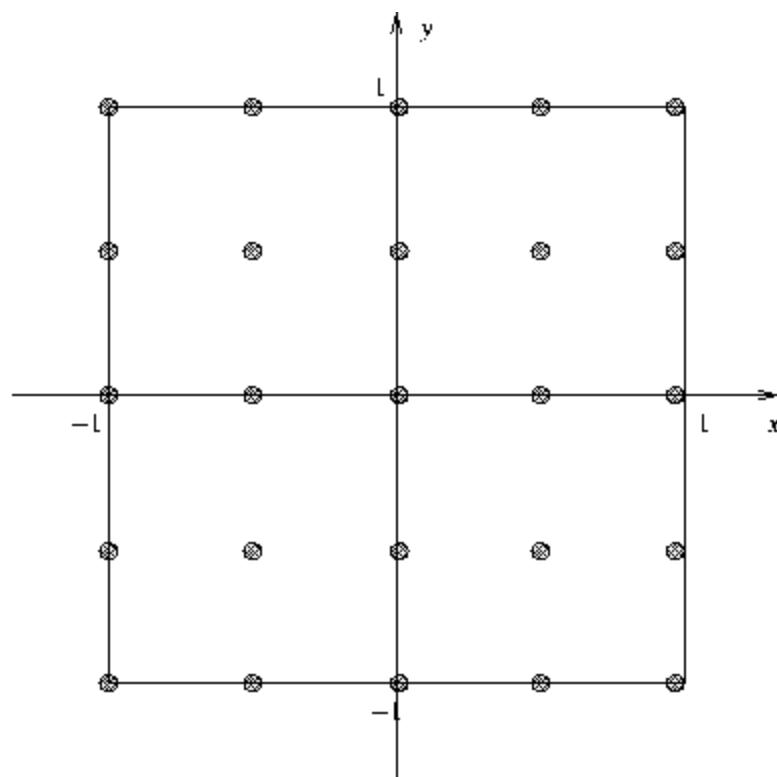


Figura 6.1: Esquema de la malla de puntos utilizada para plantear problemas bidimensionales.

$\Omega = [-1, 1]^2$. Por simplicidad proponemos una malla discreta de $(2N + 1)^2$ puntos (ver figura 6.1) que describimos utilizando la siguiente nomenclatura:

$$(x_m, y_n) \quad \text{con} \quad m, n \in \{-N + 1, \dots, 0, \dots, N - 1\} \quad (6.36)$$

donde los subíndices m, n hacen el papel de coordenadas para la cuadrícula.

El planteamiento discreto en momentos del problema (6.32) nos impone la búsqueda de $6 \times (2N - 1)^2$ variables $m_k(x_m, y_n)$ y $p_l(x_m, y_n)$ con $k = 1, 2, 3, 4$, $l = 1, 2$ y $m, n = -N + 1, \dots, 0, \dots, N - 1$. Es fácil ver que, aun para mallas pequeñas, nos enfrentamos a un voluminoso problema de optimización. En el cuadro 6.1 mostramos el número de variables en función de N para los valores más pequeños que este puede tomar.

N	Variables
2	54
3	150
4	294

Cuadro 6.1: Número de variables, en función del parámetro de malla N , para el problema de optimización 6.32.

Utilizando esta malla de puntos llegamos finalmente al problema de optimización discreto que se resume en minimizar el funcional

$$J_d(m, p) = \sum_{i,j} \{1 - 2m_3(x_i, y_j) + m_4(x_i, y_j) + p_3(x_i, y_j) + u^2(x_i, y_j)\} \Delta x \Delta y, \quad (6.37)$$

donde determinamos los valores $u(x_i, y_j)$ a partir de las expresiones

$$u(x_i, y_j) = u(x_{-N}, y_{-N+i+j}) + \sum_{k=-N+1}^i \frac{m_1(x_k, y_{k-i+j}) + p_1(x_k, y_{k-i+j})}{N} \quad (6.38)$$

cuando $i \leq j$ y

$$u(x_i, y_j) = u(x_{i-j-N}, y_{-N}) + \sum_{k=i-j-N+1}^i \frac{m_1(x_k, y_{k-i+j}) + p_1(x_k, y_{k-i+j})}{N} \quad (6.39)$$

cuando $i > j$. Las restricciones (6.38) y (6.39) son las versiones discretas de las relaciones (6.35) donde hemos tomado las curvas C como los segmentos de recta paralelos a la diagonal principal de Ω (ver figura 6.2). Este par de restricciones ((6.38) y (6.39)) implican $2N - 3$ restricciones en el modelo. Nuevamente destacamos que la posibilidad de escoger las curvas C para obtener (6.38) y (6.39) no es única y da una gran cantidad de posibilidades para implementar las condiciones de frontera en el caso de problemas bidimensionales. También recordamos que este tipo de restricciones tienen un equivalente trivial en los problemas unidimensionales.

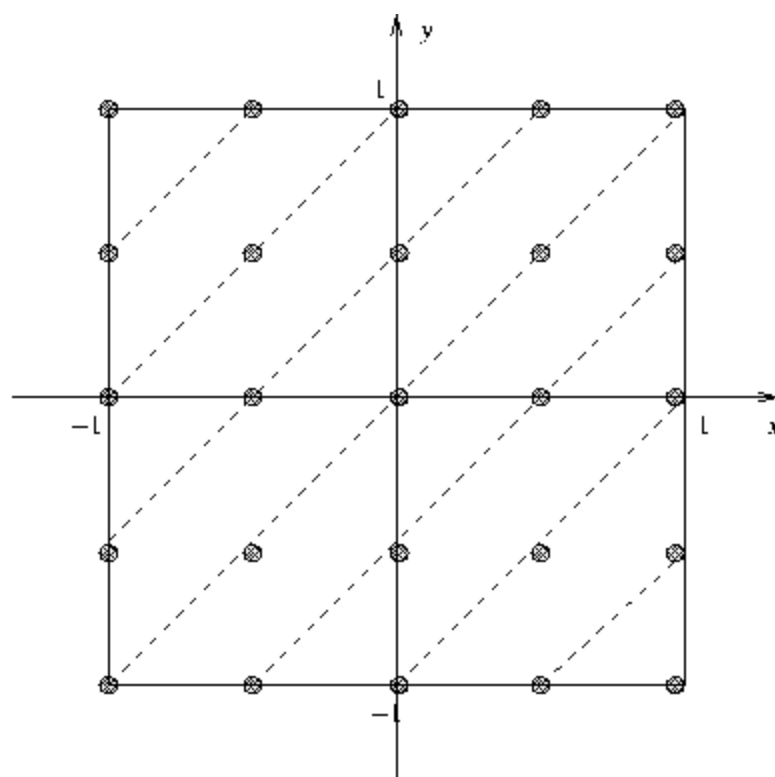


Figura 6.2: Caminos elegidos para determinar $u(x,y)$ en un problema bidimensional.

En el siguiente capítulo aplicaremos este método para estimar microestructuras en modelos variacionales bidimensionales.

Capítulo 7

Cálculo de una Microestructura Bidimensional

Procedemos a aplicar la discretización del problema de optimización (6.28) a tres casos concretos con diferentes condiciones de frontera. Por simplicidad no tomaremos en cuenta el término $u^2(x, y)$ en el funcional. Como veremos cada tipo de condición de frontera determina el comportamiento cualitativo de las sucesiones minimizantes (recordemos que éstas nos permiten determinar la existencia de minimizadores para el problema variacional). Resaltamos también que con el procedimiento presentado en el capítulo anterior podemos abordar problemas que no cumplan el supuesto de convexidad y representar balances energéticos en elasticidad. El problema discreto se puede escribir de la siguiente manera:

$$\min_{m,p} J_d(m, p) = \sum_{i,j} \{1 - 2m_2(x_i, y_j) + m_4(x_i, y_j) + p_2(x_i, y_j)\} \Delta x \Delta y, \quad (7.1)$$

sujeto a las condiciones sobre los momentos

$$\begin{pmatrix} 1 & m_1(x_i, y_j) & m_2(x_i, y_j) \\ m_1(x_i, y_j) & m_2(x_i, y_j) & m_3(x_i, y_j) \\ m_2(x_i, y_j) & m_3(x_i, y_j) & m_4(x_i, y_j) \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (7.2)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & p_1(x_i, y_j) \\ p_1(x_i, y_j) & p_2(x_i, y_j) \end{pmatrix} \succeq 0 \quad (7.3)$$

para todo i, j y las condiciones sobre el gradiente de u

$$u(x_i, y_{N-1}) = u(x_{-N+1}, y_{-i}) + \sum_{k=-N+1}^i \frac{m_1(x_k, y_{k-i+N-1}) + p_1(x_k, y_{k-i+N-1})}{N} \quad (7.4)$$

$$\begin{array}{l|l|l} m_1(x_i, y_j) = 0 & m_3(x_i, y_j) = 1 & p_1(x_i, y_j) = 0 \\ m_3(x_i, y_j) = 0 & m_4(x_i, y_j) = 1 & p_3(x_i, y_j) = 0 \end{array}$$

Cuadro 7.1: Valores de m_i , p_j para el primer ejemplo.

y

$$u(x_{N-1}, y_j) = u(x_{-j}, y_{-N+1}) + \sum_{k=-j}^{N-1} \frac{m_1(x_k, y_{k-N+1+j}) + p_1(x_k, y_{k-N+1-j})}{N} \quad (7.5)$$

Donde (x_i, y_{N-1}) , (x_{-N+1}, y_{-i}) , (x_{N-1}, y_j) y (x_{-j}, y_{-N+1}) son puntos sobre la frontera del dominio $\partial\Omega$.

Primer ejemplo

Para este primer caso tomamos la condición de frontera

$$u|_{\partial\Omega} = 0. \quad (7.6)$$

Esta condición se traduce en

$$u(x_i, y_{N-1}) = u(x_{-N+1}, y_{-i}) = u(x_{N-1}, y_j) = u(x_{-j}, y_{-N+1}) = 0$$

y por lo tanto las condiciones sobre el gradiente toman la forma

$$0 = \sum_{k=-N+1}^i \frac{m_1(x_k, y_{k-i+N-1}) + p_1(x_k, y_{k-i+N-1})}{N} \quad (7.7)$$

con $i = \{-N+1, \dots, N-1\}$ y

$$0 = \sum_{k=j}^{N-1} \frac{m_1(x_k, y_{k-N+1+j}) + p_1(x_k, y_{k-N+1-j})}{N} \quad (7.8)$$

$j = \{-N+1, \dots, N-1\}$.

Al resolver el problema (7.1) sujeto a las condiciones (7.2), (7.3), (7.7) y (7.8) obtenemos los valores m_1 , m_3 , m_4 , p_1 y p_3 del cuadro 7.1.

A partir de los valores para los momentos m y p , empleando los procedimientos algebraicos del capítulo 3, encontramos que la solución al problema generalizado tiene la forma

$$\bar{\mu}_{i,j} = \frac{1}{2}\delta_{(-1,0)} + \frac{1}{2}\delta_{(1,0)}, \quad (7.9)$$

para todo i, j , que nos dice que el problema original no tiene solución con estas condiciones de contorno pero que sus sucesiones minimizantes presentan una

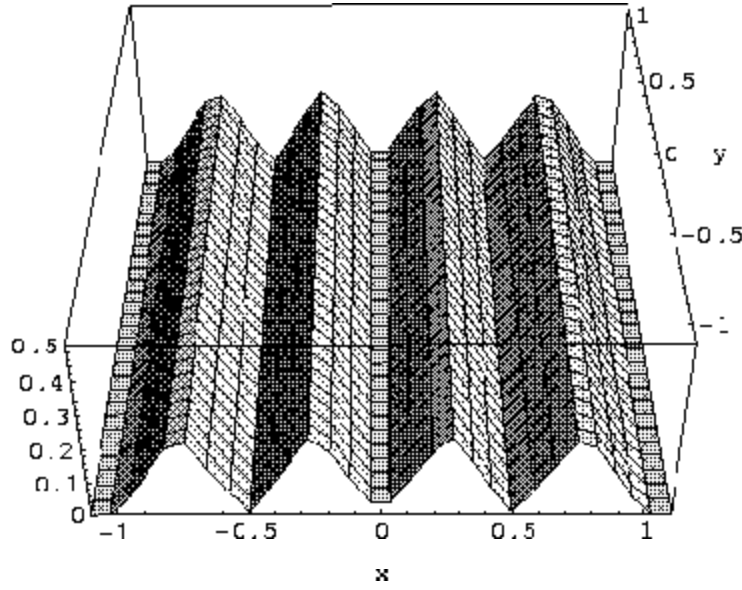


Figura 7.1: Comportamiento de las sucesiones minimizantes del primer ejemplo.

$$\begin{array}{l|l|l} m_1(x_i, y_j) = 1 & m_3(x_i, y_j) = 1 & p_1(x_i, y_j) = 0 \\ m_3(x_i, y_j) = 1 & m_4(x_i, y_j) = 1 & p_3(x_i, y_j) = 0 \end{array}$$

Cuadro 7.2: Valores de m_i, p_j para el segundo ejemplo.

oscilación persistente en la dirección del eje x . En otras palabras el ínfimo de $J(u)$ se encuentra cuando los gradientes $\vec{\nabla}u$ alternen entre los valores $(-1, 0)$ y $(1, 0)$ con igual proporción. Los valores $(-1, 0)$ y $(1, 0)$ representan la configuración energética estable que dará lugar a la microestructura en el material.

Para la reconstrucción de las medidas óptimas se han empleado los métodos descritos en la sección 3.2.1. En la figura 7.1 se puede observar el comportamiento de las sucesiones minimizantes para el problema.

Segundo ejemplo

Proponemos ahora la siguiente condición de frontera

$$u|_{\partial\Omega} = \begin{cases} 1+x & \text{en } y = \pm 1 \\ 0 & \text{en } x = -1 \\ 2 & \text{en } x = 1 \end{cases} \quad (7.10)$$

Al resolver el problema (7.1) sujeto a las condiciones (7.2), (7.3) y las condiciones apropiadas sobre el gradiente dadas por (7.10) obtenemos los valores

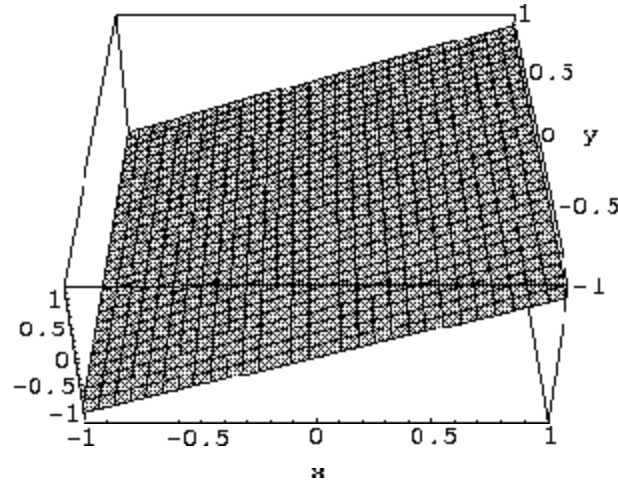


Figura 7.2: Comportamiento de las sucesiones minimizantes del segundo ejemplo.

m_1, m_2, m_3, m_4, p_1 y p_2 del cuadro 7.2.

A partir de los valores para los momentos m y p deducimos que la solución al problema generalizado tiene la forma

$$\mu_{i,j} = \delta_{(1,0)} \quad (7.11)$$

que nos dice que el problema variacional original tiene solución con un minimizador descrito por el plano

$$u^*(x, y) = x. \quad (7.12)$$

En la figura 7.2 se puede observar el comportamiento de la solución del problema.

En este caso tan solo hay un estado de energía estable: $(1, 0)$ de forma que la microestructura subyacente emplea éste estado en toda la extensión del material.

Tercer ejemplo

Proponemos ahora la siguiente condición de frontera

$$u|_{\partial\Omega} = \begin{cases} 1 - |x| & \text{en } y = \pm 1 \\ 0 & \text{en } x = -1 \\ 0 & \text{en } x = 1 \end{cases}. \quad (7.13)$$

Al resolver el problema (7.1) sujeto a las condiciones (7.2), (7.3) y las condiciones apropiadas sobre el gradiente dadas por (7.13) obtenemos los valores m_1, m_2, m_3, m_4, p_1 y p_2 del cuadro 7.3.

$$\begin{array}{l|l}
m_1(x_i, y_j) = -1 \text{ en } -1 \leq x \leq 0 & m_3(x_i, y_j) = 1 \text{ en } -1 \leq x \leq 1 \\
m_3(x_i, y_j) = -1 \text{ en } -1 \leq x \leq 0 & m_4(x_i, y_j) = 1 \text{ en } -1 \leq x \leq 1 \\
m_1(x_i, y_j) = +1 \text{ en } 0 < x \leq 1 & m_3(x_i, y_j) = 1 \text{ en } 0 < x \leq 1 \\
p_1(x_i, y_j) = 0 & \\
p_2(x_i, y_j) = 0 &
\end{array}$$

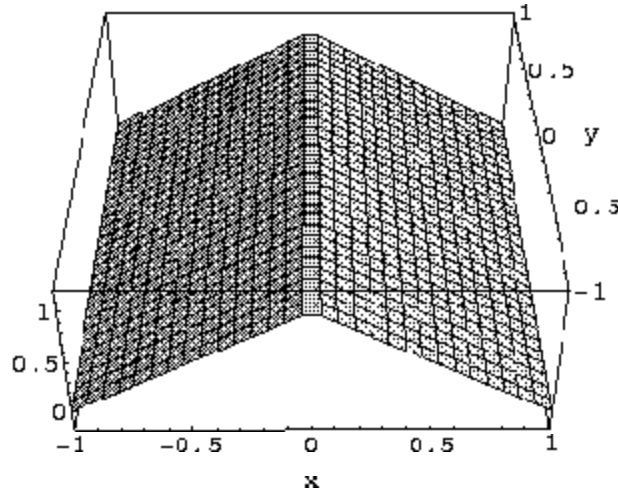
Cuadro 7.3: Valores de m_i , p_j para el tercer ejemplo.

Figura 7.3: Comportamiento de las sucesiones minimizantes del tercer ejemplo.

A partir de los valores para los momentos m y p deducimos que la solución al problema generalizado tiene la forma

$$\mu_{i,j} = \begin{cases} \delta_{(1,0)} & \text{en } -1 \leq x \leq 0 \\ \delta_{(-1,0)} & \text{en } 0 < x \leq 1 \end{cases} \quad (7.14)$$

que nos dice que el problema variacional original tiene solución con un minimizador descrito por la función “tienda”

$$u^*(x, y) = 1 - |x|. \quad (7.15)$$

En la figura 7.3 se puede observar el comportamiento de la solución del problema. En este caso, aunque tenemos dos estados energéticos estables: $(1, 0)$ y $(-1, 0)$, cada uno de ellos se establece en una región específica del cuerpo, dando así otra forma posible de microestructura.

Resumiendo: hemos presentado un procedimiento para resolver problemas variacionales no convexos de la forma (6.1). Notamos que el cálculo de variaciones no provee una respuesta concreta sobre la existencia de minimizadores

para un problema no convexo [1]. El caso particular que se ha tratado de un funcional separable tampoco ha sido estudiado a la fecha según el conocimiento de los autores.

Un punto importante para resaltar aquí es la reducción de un problema variacional a uno de optimización discreta con la estructura típica que caracteriza la programación semidefinida. Esto lo hemos logrado retirando la no convexidad del funcional, utilizando la caracterización de momentos de una medida de Young. El funcional a minimizar en (6.17) es lineal en los momentos y por lo tanto convexo. Debe ser claro que una buena implementación numérica del problema (6.17) nos entregará las variables que representan el mínimo global a diferencia del problema (6.1) en donde podemos encontrar mínimos globales o tener un problema sin solución. Esta situación requiere de software adecuado para manejar problemas semidefinidos con un gran número de variables y de restricciones. Explicaremos este punto en el capítulo 11.

El problema (6.1) puede no tener solución pero su nueva formulación (6.17) siempre la tiene. En general esta solución es única y nos provee información definitiva sobre la posible solución de (6.2). Como se ha explicado en el capítulo 4 la solución de (6.1) nos permite recuperar una medida de probabilidad soportada en máximo dos puntos. En el caso de soporte doble sabemos que el problema original carece de solución pero podemos inferir sus soluciones minimizantes y de aquí inferir la microestructura subyacente. Además podemos responder una pregunta analítica: la existencia de minimizadores de un problema variacional no convexo, mediante un método numérico; recordamos que no hay respuesta aun por otras vías a esta pregunta analítica.

Indicamos también que, al igual que en el caso unidimensional, este procedimiento nos permitirá calcular las distribuciones de la microestructura de una plancha de acero de baja densidad. De hecho, como ya lo hemos dicho, los problemas variacionales se encuentran en muchas áreas del conocimiento y en muchos casos estos problemas tienen naturaleza no convexa. El método de los momentos para problemas bidimensionales es una importante opción para el estudio de problemas de este tipo.

La conclusión más importante de este capítulo, es que podemos tratar modelos variacionales propios de problemas de elasticidad y obtener de ellos la microestructura subyacente. Esta microestructura está representada por las medidas parametrizadas óptimas, que resultan de resolver mediante relajación semidefinida, el correspondiente problema variacional generalizado, descrito en medidas de Young.

Capítulo 8

Teoría de Policonvexidad en Elasticidad

En este capítulo trataremos un concepto de gran importancia para entender problemas variacionales vectoriales en elasticidad. El planteamiento variacional general en elasticidad nos lleva a estudiar funcionales con la forma:

$$I(u) = \iint_{\Omega} \left\{ \phi(x, y, \vec{\nabla} u) + \psi(x, y, u) \right\} dx dy \quad (8.1)$$

donde las funciones admisibles son campos vectoriales de desplazamientos:

$$u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^2 \quad (8.2)$$

sujetos a unas condiciones de contorno particulares:

$$u = g \quad \text{en} \quad \partial\Omega. \quad (8.3)$$

Es importante resaltar que en estas condiciones el gradiente de la función u toma la forma de una matriz de deformaciones:

$$\vec{\nabla} u = \begin{pmatrix} \frac{\partial u_1}{\partial x} & \frac{\partial u_1}{\partial y} \\ \frac{\partial u_2}{\partial x} & \frac{\partial u_2}{\partial y} \end{pmatrix}, \quad (8.4)$$

por lo cual el potencial de energía de deformación depende en últimas de una matriz cuadrada de dimensión 2:

$$\phi = \phi(A) \quad A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}. \quad (8.5)$$

En el caso particular en que la función potencial ϕ dependa de manera convexa de la matriz A y su determinante, esto es:

$$\phi(A) = h(A, \det A) \quad (8.6)$$

donde h es una función escalar convexa en sus cinco parámetros, decimos que ϕ es *polyconvexa*

El concepto de policonvexidad tiene implicaciones muy importantes en modelos variacionales para elasticidad [1, 4]. Algunas propiedades de la policonvexidad son las siguientes: si ϕ es convexa entonces es policonvexa, no siendo cierta la afirmación recíproca. Considere la función $A \mapsto \det(A)$, la cual es evidentemente policonvexa pero claramente no es una función convexa. Para identificar fácilmente algunas funciones policonvexas o no policonvexas, contamos con algunos lemas de trabajo propuestos en [1].

- Cuando ϕ es una forma cuadrática:

$$\phi(A) = \langle QA, A \rangle_{\mathbb{R}^{2 \times 2}} = \sum_{i,j=1}^3 \sum_{i',j'=1}^3 q_{i,j,i',j'} a_{i,j} a_{i',j'} \quad (8.7)$$

tenemos que ϕ es policonvexa si y sólo si existe una constante c tal que

$$\phi(A) \geq c \det(A). \quad (8.8)$$

- Cuando g es una función convexa definida en el semieje $x \geq 0$, donde

$$g(0) = \min\{g(x) : x \geq 0\} \quad (8.9)$$

tenemos que

$$\phi(A) = g(\|A\|_2) \quad (8.10)$$

es una función policonvexa, donde $\|A\|_2$ representa la norma euclidiana de A como vector en $\mathbb{R}^4$. La afirmación recíproca es cierta.

- Cuando α cumple: $1 \leq \alpha \leq 3$ y g es una función real, entonces

$$\phi(A) = \|A\|_2^\alpha + g(\det(A)) \quad (8.11)$$

es polyconvexa si y sólo si g es convexa.

Estos resultados nos permiten proponer algunos ejemplos de funciones policonvexas o que no lo son:

$$\begin{array}{ll} \phi(A) = \|A\|_2^2 + (1 - \det(A)^2)^2 & \text{No es Policonvexa} \\ \phi(A) = \|A\|_2^2 & \text{Es Policonvexa} \\ \phi(A) = \|A\|_2^4 + \det(A) & \text{Es Policonvexa} \end{array} \quad (8.12)$$

En cuanto al análisis de problemas variacionales no convexos descritos en la forma:

$$\min_u I(u) = \iint_{\Omega} f(x, y, u, \vec{\nabla} u) \, dx dy \quad (8.13)$$

podemos afirmar la existencia de minimizadores siempre que la función $f(x, y, u, \cdot)$ sea policonvexa para cada punto (x, y) en el dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ [3]. En caso contrario, una apropiada relajación del problema nos lleva a considerar la envoltura

policonvexa de la función f . La pregunta natural es si este camino admite un planteamiento en forma de relajaciones semidefinidas cuando nos interesamos por potenciales f descritos por polinomios.

Veremos a continuación que la estimación de una envoltura policonvexa de un potencial polinomial ϕ , posiblemente no policonvexo como los que se ilustran en (8.12), admite un planteamiento en términos de programas semidefinidos tal como hemos visto en el análisis de envolturas convexas para polinomios.

Como es natural, esperamos que la envoltura policonvexa de ϕ la cual representaremos como ϕ_P sea la mayor función policonvexa que acote inferiormente a ϕ . Encontramos además que la envoltura convexa de ϕ no excede a su envoltura policonvexa:

$$\phi_C \leq \phi_P. \quad (8.14)$$

En [1] se plantea la estimación de la envoltura convexa de una función ϕ para matrices cuadradas de dimensión 2, a través de combinaciones convexas en la siguiente forma:

$$\phi_P(A) = \min \sum_{i=1}^6 \lambda_i \phi(A^i) \quad (8.15)$$

donde el mínimo contempla todas las combinaciones convexas con 6 términos, que involucran matrices A^i de dimensión 2×2 y cumplen con las condiciones

$$\sum_{i=1}^6 \lambda_i A^i = A, \quad \sum_{i=1}^6 \lambda_i \det(A^i) = \det(A) \quad (8.16)$$

Siguiendo las mismas pautas que propusimos para analizar envolturas convexas de funciones coercivas, cada combinación convexa puede ser reemplazada por una distribución de probabilidad en el espacio de matrices $A \in \mathbb{R}^{2 \times 2}$, de manera que la estimación de la envoltura policonvexa en la matriz A de la función ϕ toma la forma:

$$\phi(A) = \min \iiint_{Q \in \mathbb{R}^4} \phi(Q) d\mu(Q) \quad (8.17)$$

$$\text{s. a.} \quad A = \iiint_{Q \in \mathbb{R}^4} Q d\mu(Q),$$

$$\det(A) = \iiint_{Q \in \mathbb{R}^4} \det(Q) d\mu(Q) \quad (8.18)$$

de esta manera podemos utilizar la forma polinomial de la función ϕ :

$$\phi(A) = \phi(x_1, x_2, x_3, x_4) = \sum_{0 \leq i+j+k+l \leq 2n} c_{ijkl} x_1^i x_2^j x_3^k x_4^l, \quad (8.19)$$

donde $A = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{pmatrix},$

para redefinir el problema de optimización en medidas (8.17) como el programa matemático:

$$\begin{aligned}\phi(A) &= \min_m \sum_{0 \leq i+j+k+l \leq 3n} c_{ijkl} m_{ijkl} \\ \text{s.a. } A &= \begin{pmatrix} m_{1000} & m_{0100} \\ m_{0010} & m_{0001} \end{pmatrix}, \\ \det(A) &= m_{1001} - m_{0110}\end{aligned}\tag{8.20}$$

en el cual las variables de diseño m_{ijkl} deben representar los momentos algebraicos de medidas de probabilidad en $\mathbb{R}^4$. Este procedimiento implica una restricción en forma de una desigualdad matricial apropiada, la cual puede llegar a ser un poco engorrosa de describir, pero sigue la misma construcción que hemos empleado para caracterizar momentos bidimensionales. Explicaremos este procedimiento con detalle a continuación.

8.1. Estimación de envolturas policonvexas

En ésta sección nos concentraremos en el cálculo de envolturas policonvexas para polinomios que representan funciones definidas en matrices como los listados en (8.11), cuyo comportamiento es, en términos generales, no policonvexo. Este tratamiento se realiza a través del método de los momentos asociados a distribuciones de probabilidad soportadas en espacios euclidianos con $2n$ dimensiones. De igual manera que en el cálculo de envolturas convexas bidimensionales del Capítulo 5 utilizaremos programas semidefinidos [14].

El objetivo es abordar problemas variacionales vectoriales. Para la mejor comprensión del lector, se ilustrará todo el tratamiento para un polinomio en cuatro variables de cuarto grado.

La noción de policonvexidad fue introducida por Ball en 1977 [1, 3]. Una función $f : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$ es policonvexa si existe $h : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$ convexa, tal que:

$$\phi(A) = h(T(A))\tag{8.21}$$

donde $T : \mathbb{R}^5 \rightarrow \mathbb{R}$ depende del determinante de A y las entradas de A :

$$T(A) = (A, \det(A))\tag{8.22}$$

Nos centraremos en estimar la envoltura policonvexa, ϕ_p , a un polinomio en un espacio de cuatro variables ($m = 2$ y $n = 2$).

Por lo tanto ϕ es una función en las entradas de la matriz A . A continuación ilustramos el método de los momentos para un polinomio de cuarto orden.

Dado el polinomio ϕ definido en las entradas de la matriz A , que aquí tomaremos como un punto $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ en $\mathbb{R}^4$:

$$\phi(x) = \sum_{0 \leq i+j+k+l \leq 3n} c_{ijkl} x_1^i x_2^j x_3^k x_4^l\tag{8.23}$$

donde,

$$A = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} \quad (8.24)$$

la envoltura policonvexa de ϕ calculada en una matriz particular A

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad (8.25)$$

admite la representación como un problema de optimización:

$$\begin{aligned} \phi_p(A) &= \min_{\mu} \int_{\mathbb{R}^4} \phi(Q) d\mu(Q) \\ \text{sujeto a } \det(A) &= \int_{\mathbb{R}^4} \det(Q) d\mu(Q) \end{aligned} \quad (8.26)$$

Donde μ representa la familia de medidas de probabilidad en el espacio $\mathbb{R}^4$, con momentos de primer orden iguales a las entradas de la matriz A :

$$\int_{\mathbb{R}^4} \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} d\mu = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \quad (8.27)$$

Así podemos transformar el problema de calcular la envoltura policonvexa de ϕ en una matriz particular como el siguiente programa matemático:

$$\begin{aligned} \phi_p(A) &= \min_m \sum_{0 \leq i+j+k+l \leq 3n} c_{i,j,k,l} m_{i,j,k,l} \\ \text{s. a. } \det(A) &= m_{1001} - m_{0110} \\ \begin{bmatrix} m_{1000} & m_{0100} \\ m_{0010} & m_{0001} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (8.28)$$

donde m es una representación de la matriz de momentos en cuatro dimensiones, cuyos componentes están dados por los momentos asociados a la medida μ

$$m_{i,j,k,l} = \int x_1^i x_2^j x_3^k x_4^l d\mu(x_1, x_2, x_3, x_4). \quad (8.29)$$

Para caracterizar los momentos en el programa matemático (8.28) utilizamos las matrices de restricción, sobre las que imponemos la condición de ser semidefinidas positivas, tal como hicimos en el Capítulo 5. A continuación describimos el procedimiento que nos permite extender este concepto de matriz de restricción a problemas en cuatro dimensiones.

1. Dadas las funciones $x_1^i x_2^j x_3^k x_4^l$, donde $0 \leq i+j+k+l \leq n$, las escribimos en forma de lista en la primera fila y la primera columna de una tabla. Ver cuadro 8.1

2. Para completar todas las entradas en el interior de la tabla, realizamos la multiplicación entre cada elemento de la primera fila y cada elemento de la primera columna. Así obtenemos una matriz con las funciones:

$$\begin{aligned} x_1^{i+i'} x_2^{j+j'} x_3^{k+k'} x_4^{l+l'} \\ 0 \leq i+j+k+l \leq n \\ 0 \leq i'+j'+k'+l' \leq n \end{aligned} \quad (8.30)$$

3. Por último, se cambian por su correspondiente momento:

$$x_1^i x_2^j x_3^k x_4^l \longrightarrow m_{ijkl} \quad (8.31)$$

De igual forma que en el cálculo de envolturas convexas bidimensionales, obtenemos una matriz de restricción que debe ser semidefinida positiva. Con ello aseguramos que el problema incluye momentos en cuatro dimensiones. Por ser de nuestro interés un polinomio de cuarto orden en cuatro dimensiones mostramos este proceso en el cuadro 8.1.

	1	x_1	...	x_4	x_1^3	...	x_4^3	$x_1 x_2$	...	$x_3 x_4$
1	1	x_1	...	x_4	x_1^3	...	x_4^3	$x_1 x_2$	...	$x_3 x_4$
x_1	x_1	x_1^2	...	$x_1 x_4$	x_1^3	...	$x_1 x_4^3$	$x_1^2 x_2$	...	$x_1 x_3 x_4$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_4	x_4	$x_1 x_4$	...	x_4^2	$x_1^2 x_4$	...	x_4^3	$x_1 x_2 x_4$	...	$x_3 x_4^2$
x_1^3	x_1^3	x_1^3	...	$x_1^2 x_4$	x_1^4	...	$x_1^2 x_4^3$	$x_1^3 x_2$	...	$x_1^3 x_3 x_4$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
x_4^3	x_4^3	$x_1 x_4^3$	...	x_4^3	$x_1^2 x_4^3$	...	x_4^4	$x_4^2 x_1 x_2$	...	$x_4^3 x_3$
$x_1 x_2$	$x_1 x_2$	$x_1^2 x_2$	...	$x_1 x_2 x_4$	$x_1^3 x_2$	...	$x_1^2 x_1 x_2$	$x_1^2 x_2^2$	...	$x_1 x_2 x_3 x_4$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$x_3 x_4$	$x_3 x_4$	$x_1 x_3 x_4$	...	$x_3 x_4^2$	$x_1^2 x_3 x_4$	...	$x_4^3 x_3$	$x_1 x_2 x_3 x_4$	...	$x_3^2 x_4^2$

Cuadro 8.1: Tabla de funciones para restricción.

Procedemos ahora a convertir la matriz de polinomios en sus respectivos momentos, para obtener así la matriz de restricción que debe ser semidefinida.

positiva:

$$M = \begin{bmatrix} m_{0000} & m_{1000} & \dots & m_{0001} & m_{2000} & \dots & m_{0003} & m_{1100} & \dots & m_{0011} \\ m_{1000} & m_{2000} & \dots & m_{1001} & m_{3000} & \dots & m_{1003} & m_{2100} & \dots & m_{1011} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{0001} & m_{1001} & \dots & m_{0003} & m_{2001} & \dots & m_{0003} & m_{1101} & \dots & m_{0013} \\ m_{2000} & m_{3000} & \dots & m_{2001} & m_{4000} & \dots & m_{2003} & m_{3100} & \dots & m_{2011} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{0003} & m_{2100} & \dots & m_{1101} & m_{3100} & \dots & m_{1103} & m_{2200} & \dots & m_{1111} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{0011} & m_{1011} & \dots & m_{0013} & m_{2011} & \dots & m_{0013} & m_{1111} & \dots & m_{0033} \end{bmatrix} \quad (8.32)$$

Por lo tanto, el problema de hallar la envoltura policonvexa de una función ϕ en la matriz A , como hemos hecho en (8.23), se reduce a un programa semidefinido con la siguiente forma:

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && \sum_{0 \leq i+j+k+l \leq 4} c_{i,j,k,l} m_{i,j,k,l} \\ & \text{s. a.} && M \geq 0 \\ & && a_1 a_4 - a_2 a_3 = m_{1001} - m_{0110} \\ & && A = \begin{bmatrix} m_{1000} & m_{0100} \\ m_{0010} & m_{0001} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (8.33)$$

donde $m_{0000} = 1$ para asegurar que los valores m_{ijkl} son los momentos de una distribución de probabilidad en $\mathbb{R}^4$. La segunda restricción en (8.33) proviene de la definición de policonvexidad como está dado en (8.16).

De igual forma, se lleva este programa matemático a la forma estándar de la programación semidefinida para poderlo resolver numéricamente

$$\begin{aligned} & \text{Minimizar} && \sum_{0 \leq i+j+k+l \leq 4} c_{i,j,k,l} m_{i,j,k,l} \\ & \text{s. a.} && R + M_2 \geq 0 \\ & && a_1 a_4 - a_2 a_3 = m_{1001} - m_{0110}, \end{aligned} \quad (8.34)$$

donde R es una matriz del mismo tamaño que la matriz M y todas sus posiciones son ceros (matriz rara) exceptuando las posiciones $(1,1)$, $(1,2)$, $(1,3)$, $(1,4)$, $(1,5)$, $(2,1)$, $(3,1)$, $(4,1)$, y $(5,1)$ las cuales contienen las componentes 1 , a_{11} , a_{13} , a_{31} , a_{33} , a_{11} , a_{13} , a_{31} y a_{33} respectivamente. De igual forma la matriz M_2 posee las mismas componentes de M exceptuando por las posiciones anteriormente

mencionadas las cuales contienen ceros

$$M_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & m_{2000} & \dots & m_{0003} & m_{1100} & \dots & m_{0011} \\ 0 & m_{3000} & \dots & m_{1001} & m_{3000} & \dots & m_{1003} & m_{3100} & \dots & m_{1011} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & m_{1001} & \dots & m_{0003} & m_{3001} & \dots & m_{0003} & m_{1101} & \dots & m_{0013} \\ m_{3000} & m_{3000} & \dots & m_{3001} & m_{1000} & \dots & m_{3003} & m_{3100} & \dots & m_{3011} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{0003} & m_{3100} & \dots & m_{1101} & m_{3100} & \dots & m_{1103} & m_{3300} & \dots & m_{1111} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ m_{0011} & m_{1011} & \dots & m_{0013} & m_{3011} & \dots & m_{0013} & m_{1111} & \dots & m_{0033} \end{bmatrix} \quad (8.35)$$

$$R = \begin{bmatrix} 1 & a_{11} & \dots & a_{23} & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{11} & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{23} & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \quad (8.36)$$

El algoritmo empleado para resolver este problema se muestra a continuación. En el Capítulo 11 daremos una explicación más profunda de la programación semidefinida y las ayudas computacionales que tenemos actualmente para resolver este tipo de programas convexos.

```
function [fopt,mom] = envoltura4Db(Val,c,S)
%DEFINICION DEL PROBLEMA LMI
%ENTRADAS:
% a: Punto X de la malla
% b: Punto y de la malla
% c: Coeficientes del vector de funcion objetivo
%SALIDAS:
% fopt: Valor de la funcion objetivo en el punto optimo
% mom: Momentos optimos
%Inicializa toolbox LMI
setlmi([]);
%Matriz de coeficientes constantes
A=zeros(size(S));
A(1,1) = 1;
A(1,2)=Val(1,1);
A(1,3)=Val(1,2);
```

```

A(1,4)=Val(2,1);
A(1,5)=Val(2,2);
A(2,1)=Val(1,1);
A(3,1)=Val(1,2);
A(4,1)=Val(2,1);
A(5,1)=Val(2,2);
%Definicion de la variable
M = lmivar(3,S);
vect = zeros(1,length(S)).';
vect(17) = 1;
vect(40) = -1;

%vect(12) = 1;
%vect(13) = -1;
vec = [1/2 zeros(1,length(S)-1)];
%Definicion de la restriccion
lmiterm([-1 1 1 M],1,1);
lmiterm([-1 1 1 0],A);
lmiterm([-2 1 1 M],vec,vect,'s');
lmiterm([2 1 1 0],det(Val)-0.00000001);
%Restricción de determinante
lmiterm([3 1 1 M],vec,vect,'s');
lmiterm([-3 1 1 0],det(Val)+0.00000001);
%Almacenamiento del problema
LMIs = getlmis;
%Resolucion del problema de optimizacion
[fopt,mom] = mincx(LMIs,c);

```

Hemos empleado las rutinas comercial de la Toolbox de programación semidefinida sobre MatLab 6.1[®] hechas por Gahinet *et. al.* [14]. Ver Capítulo 11 para una descripción más detallada de estas herramientas.

8.1.1. Ejemplos

Ejemplo 1 Como ejemplo, para evaluar la eficacia del algoritmo ilustramos un caso en particular. Sea

$$\phi(A) = (1 - \det(A))^2 \quad (8.37)$$

donde

$$A = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix}. \quad (8.38)$$

En este caso estamos tratando con un polinomio de octavo grado, por lo tanto la matriz de restricción tiene dimensiones 70×70 , lo cual hace de este programa un problema difícil en programación no lineal. Volveremos sobre ello en el Capítulo 11.

Hallamos la envoltura policonvexa de la función (8.37) en la matriz:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0,1 \\ 0,5 & 0,3 \end{bmatrix} \quad (8.39)$$

y al utilizar la rutina anteriormente mostrada que resuelve el programa (8.34), obtenemos como valor de la envoltura policonvexa 0,1. Algunos de los momentos óptimos obtenidos se muestran en el cuadro 8.2. El valor obtenido de la envoltura policonvexa en este punto indica que la función no es convexa, puesto que $\phi(A) = 0,8789$ en este punto.

Para este ejemplo el valor que obtenemos para la envoltura policonvexa es menor al valor de la evaluación de la función, por lo tanto estamos encontrando los momentos óptimos que resuelven la envoltura convexa en la matriz (8.39).

Ejemplo 2 Ahora, consideramos el polinomio,

$$\phi(A) = (1 + \det(A))^2 \quad (8.40)$$

donde, de igual manera,

$$A = \begin{bmatrix} x_1 & x_3 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix}. \quad (8.41)$$

Con anterioridad sabemos que este caso representa un polinomio policonvexo, por lo tanto el algoritmo debe detectar que $\phi = \phi_p$.

Hallamos la envoltura policonvexa de la función ϕ dada en (8.40) en la matriz:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 6 \end{bmatrix} \quad (8.42)$$

y al utilizar la rutina anteriormente mostrada que resuelve el programa (8.34), obtenemos como valor de la envoltura policonvexa 0. Todos los momentos óptimos obtenidos se muestran en la tabla 8.3.

En este ejemplo obtenemos que el valor de la envoltura policonvexa es igual al valor de la evaluación de la función $\phi(A) = 1$, por lo tanto podemos concluir que el polinomio es policonvexo en la matriz A , este era el resultado esperado, dado que el polinomio (8.40) es policonvexo por definición.

Momento	Valor	Momento	Valor	Momento	Valor	Momento	Valor	Momento	Valor
m_{3000}	1.6119	m_{1100}	0.5581	m_{0310}	0.0782	m_{2301}	0.2453	m_{2310}	0.0831
m_{1010}	0.1116	m_{2100}	0.7376	m_{0301}	0.1589	m_{1311}	0.0283	m_{2301}	0.1899
m_{2010}	0.1430	m_{3100}	0.9064	m_{0400}	1.8542	m_{1302}	0.3127	m_{2400}	2.4029
m_{3010}	0.1750	m_{0110}	0.0732	m_{4010}	0.2301	m_{2300}	0.7326	m_{1050}	0.1001
m_{0020}	0.7531	m_{1110}	0.0842	m_{3020}	0.7846	m_{1310}	0.0828	m_{1041}	0.0857
m_{1020}	0.4889	m_{2110}	0.0944	m_{2030}	0.1230	m_{1301}	0.1636	m_{1032}	0.0413
m_{2020}	1.0382	m_{0120}	0.1910	m_{1040}	0.5653	m_{1400}	0.8929	m_{1023}	0.0781
m_{0030}	0.1027	m_{1120}	0.1789	m_{5000}	3.3920	m_{0050}	0.1309	m_{1014}	0.0611
m_{1030}	0.0980	m_{0130}	0.0762	m_{4001}	0.6785	m_{0041}	0.1366	m_{1140}	0.1396
m_{0040}	1.5515	m_{0101}	0.1741	m_{3011}	0.1042	m_{0032}	0.0511	m_{1131}	0.4134
m_{4000}	3.3459	m_{1101}	0.1975	m_{2021}	0.1260	m_{0023}	0.1304	m_{1122}	0.0428
m_{1001}	0.3232	m_{2101}	0.2427	m_{1031}	0.0649	m_{0014}	0.0659	m_{1113}	0.4358
m_{2001}	0.4216	m_{0111}	0.0775	m_{3002}	0.8144	m_{0140}	0.1791	m_{1330}	0.0717
m_{3001}	0.5161	m_{1111}	0.2035	m_{2012}	0.0859	m_{0131}	0.0947	m_{1321}	0.0382
m_{0011}	0.0564	m_{0121}	0.0407	m_{1022}	0.2142	m_{0122}	0.0772	m_{1312}	0.0216
m_{1011}	0.0716	m_{0102}	0.2473	m_{2003}	0.3183	m_{0113}	0.1086	m_{1330}	0.1896
m_{2011}	0.0752	m_{1102}	0.2292	m_{1013}	0.0896	m_{0230}	0.0796	m_{1311}	0.3985
m_{0021}	0.1210	m_{0112}	0.0446	m_{1004}	0.4346	m_{0221}	0.0640	m_{1410}	0.0727
m_{1021}	0.0970	m_{0103}	0.1294	m_{4100}	1.2210	m_{0212}	0.0303	m_{5020}	1.2329
m_{0031}	0.0491	m_{0300}	0.9755	m_{3110}	0.1209	m_{0320}	0.2319	m_{4030}	0.1736
m_{0002}	0.7887	m_{1300}	0.7487	m_{2120}	0.2313	m_{0311}	0.0869	m_{3040}	0.7066
m_{1002}	0.4960	m_{2300}	1.3631	m_{1130}	0.0827	m_{0410}	0.0820	m_{2050}	0.1240
m_{2002}	0.9152	m_{0310}	0.0689	m_{3101}	0.2989	m_{0104}	0.2371	m_{6010}	0.3678
m_{0012}	0.0645	m_{1310}	0.0677	m_{2111}	0.0716	m_{0203}	0.1803	m_{5011}	0.1606
m_{1012}	0.0673	m_{0320}	0.6000	m_{1121}	0.0359	m_{0302}	0.2641	m_{4021}	0.1797
m_{0022}	0.7093	m_{0301}	0.2068	m_{2102}	0.3039	m_{0401}	0.2285	m_{3031}	0.0787
m_{0003}	0.2850	m_{1301}	0.1961	m_{1112}	0.0484	m_{0500}	0.8283	m_{2041}	0.1058
m_{1003}	0.2407	m_{0311}	0.0304	m_{1103}	0.1329	m_{0005}	0.3691	m_{4012}	0.1363
m_{0013}	0.0659	m_{0302}	0.8004	m_{2300}	1.1868	m_{5010}	0.2801	m_{3022}	0.2813
m_{0004}	1.5301	m_{0300}	0.5851	m_{2310}	0.0787	m_{4020}	2.3482	m_{2032}	0.0519
m_{3000}	1.8111	m_{1300}	0.5640	m_{1320}	0.3025	m_{3030}	0.1349	m_{3012}	0.1354

Cuadro 8.2: Tabla de algunos momentos obtenidos para prueba i

Momento	Valor	Momento	Valor
m_{0300}	$3,383e+003$	m_{1310}	$1,097e+005$
m_{1100}	$7,927e+000$	m_{0310}	$1,717e+005$
m_{1001}	$-4,499e-008$	m_{0311}	$-9,163e+004$
m_{0101}	$1,428e+001$	m_{0320}	$6,307e+006$
m_{0002}	$3,426e+003$	m_{3101}	$1,097e+005$
m_{3000}	$3,372e+003$	m_{1103}	$-9,164e+004$
m_{1010}	$5,687e+000$	m_{3100}	$5,802e+005$
m_{0110}	$9,999e-001$	m_{3110}	$1,390e+005$
m_{0011}	$1,296e+001$	m_{1111}	$6,307e+006$
m_{0030}	$3,394e+003$	m_{1130}	$3,536e+005$
m_{1300}	$1,823e+003$	m_{3003}	$6,307e+006$
m_{3100}	$3,236e+003$	m_{1003}	$7,303e+004$
m_{3001}	$4,223e+003$	m_{3001}	$1,356e+005$
m_{1101}	$2,212e+003$	m_{3011}	$3,536e+005$
m_{1003}	$7,030e+002$	m_{1013}	$5,417e+004$
m_{3000}	$3,356e+003$	m_{1031}	$1,301e+005$
m_{3010}	$4,724e+003$	m_{0103}	$2,099e+005$
m_{1110}	$4,224e+003$	m_{0113}	$7,646e+004$
m_{1011}	$1,488e+003$	m_{0131}	$5,419e+004$
m_{1030}	$1,681e+003$	m_{0004}	$3,213e+007$
m_{0300}	$7,025e+003$	m_{0013}	$1,560e+005$
m_{0301}	$9,443e+003$	m_{0023}	$1,367e+007$
m_{0103}	$3,354e+003$	m_{4000}	$3,084e+007$
m_{0310}	$2,214e+003$	m_{3010}	$2,163e+005$
m_{0111}	$7,090e+002$	m_{3030}	$1,434e+007$
m_{0130}	$1,491e+003$	m_{1030}	$-4,337e+004$
m_{0013}	$5,155e+003$	m_{0130}	$1,335e+005$
m_{0031}	$9,339e+003$	m_{0031}	$2,077e+005$
m_{0030}	$1,049e+004$	m_{0040}	$3,153e+007$
m_{0003}	$2,124e+004$		
m_{0400}	$3,126e+007$		
m_{1300}	$-2,204e+005$		
m_{1301}	$1,684e+005$		
m_{0301}	$-5,593e+004$		
m_{0303}	$1,427e+007$		
m_{3300}	$1,412e+007$		

Cuadro 8.3: Tabla de algunos momentos obtenidos para el Ejemplo 2

Capítulo 9

Herramientas Computacionales Para Calcular Microestructuras: AMPL

La programación matemática es, hoy en día, una de las áreas más estudiadas y trabajadas en el mundo técnico y científico. De hecho toda labor en ingeniería intenta modelar el mundo a través de modelos matemáticos que reproduzcan la realidad de la mejor forma posible. Los problemas de programación matemática son problemas particulares comunes y existen una gran variedad de herramientas, teorías y paquetes de software disponibles para su solución. Dentro de esta categoría existen tipos de problemas que no son fáciles de tratar como:

1. Problemas lineales con gran número de variables y/o restricciones
2. Problemas de programación no lineales
3. Optimización a gran escala

entre otros. Dado que en la práctica es casi imposible solucionar problemas grandes sin la ayuda de buen software, haremos una breve descripción del lenguaje AMPL donde se explicará su naturaleza, sintaxis y modo de uso junto con problemas clásicos de optimización y su solución. Trabajaremos el problema de Bolza presentado en la sección 3.2.4 con el método de los momentos previamente expuesto e incluiremos el código utilizado para calcular la microestructura del capítulo 4

AMPL es un paquete de software desarrollado en Bell Labs por R. Fourer, D.M. Gay y B. W. Kernighan en 1985 C [12]. A grandes rasgos es un lenguaje de modelaje algebraico para problemas de optimización lineales y no lineales,

en variables continuas o discretas. AMPL permite que el usuario utilice un lenguaje algebraico para plantear modelos de optimización y examinar soluciones mientras que el computador se comunica con un solucionador particular. La versión profesional de AMPL no tiene límites en el número de variables y restricciones que puede manejar, excepto por la capacidad del computador donde éste está instalado.

AMPL realmente es una interfaz entre el usuario y el solucionador. El papel que juega AMPL es el de proveer una interfaz sencilla con diferentes solucionadores o *solvers*. El proceso para solucionar un problema de optimización utilizando este software se puede enumerar en los siguientes pasos:

1. Plantear el modelo del problema a resolver, el sistema de variables, objetivos y restricciones que representan el modelo general.
2. Especificar los datos que definen el problema en particular.
3. Solucionar el problema indicándole a AMPL el tipo de solucionador que utiliza un algoritmo ideal para el tipo de problema.
4. Extraer información del solucionador y analizar los resultados.
5. Refinar el modelo y datos si es necesario repetir el análisis.

Como se puede observar AMPL realmente es una interfaz entre el usuario y el solucionador que éste escoja para resolver su problema. Esto puede parecer trivial pero la forma como una persona formula un problema, en general, es bastante diferente a la forma en que lo entiende un solucionador y el proceso de traducción de uno a otro es costoso en tiempo y propenso a errores.

Una ventaja notable de AMPL sobre otros programas similares es que la notación utilizada para definir expresiones matemáticas es muy parecida a la algebraica estándar. Transcribir expresiones matemáticas a lenguaje AMPL es trivial y no requiere notación distinta a la algebraica. AMPL también extiende la notación algebraica para expresar estructuras comunes de programación matemática tales como restricciones en flujo de redes y otros.

AMPL provee un ambiente de comandos interactivo para plantear y resolver problemas de programación matemática. Tiene una interfaz flexible que permite utilizar diferentes solucionadores, sin necesidad de modificar los modelos, para permitir el refinamiento de soluciones. Una vez que se ha encontrado la solución óptima AMPL la transforma automáticamente a la forma del modelo para que se pueda analizar directamente; también provee una gran cantidad de herramientas para formatear, examinar e imprimir resultados.

La versión de evaluación de AMPL, junto con algunos solucionadores, se puede encontrar gratuitamente en la página web: www.ampl.com, las plataformas que están soportadas son Windows, Unix/Linux y Mac OS X.

9.1. Instalación

La instalación de este paquete de software en versión de estudiante es muy sencilla y se puede resumir en los siguientes pasos:

1. Entrar a la página web de AMPL: <http://www.ampl.com>
2. Seguir el hipervínculo: "download the Student Edition".
3. Escoger una de las tres opciones que se presentan: utilizar la versión de navegador, bajar la versión para Windows o para Unix y seguir las instrucciones particulares.

Navegador: la versión de navegador le permite al usuario enviar modelos y archivos de datos a un servidor para que estos los resuelva. También permite extraer datos, una vez solucionado el modelo, en cantidad restringida. La versión de navegador de AMPL permite solucionar modelos con un límite de variables (menos de 300) y hacer hasta cinco consultas sobre la solución del problema. Los pasos para utilizar esta modalidad son:

- a) Presionar el hipervínculo "Try AMPL".
- b) Aceptar las condiciones de uso.
- c) Escoger uno de los modelos que se proponen en la página o cargar un modelo propio.
- d) Repetir el procedimiento anterior con el archivo de datos.
- e) Utilizar el botón "Submit" para indicarle al servidor que cargue el modelo, los datos.
- f) Escribir los comandos para extraer información en la caja de "AMPL commands".
- g) Escoger el solucionador deseado y presionar el botón "Send" para indicarle al servidor que corra el modelo y ejecute los comandos.
- h) Leer la información de la caja de texto "Output 1 from AMPL".

Esta opción de la página de AMPL no instala ningún programa en el computador y es útil para revisar los ejemplos que se explican en el libro [12].

Windows: la versión windows para AMPL se obtiene descargando el archivo "amplcm.zip". La instalación se completa siguiendo los siguientes pasos:

- a) Expandir el archivo amplcm.zip.
- b) El proceso de extracción crea una carpeta llamado amplcm1 que contiene el programa estándar de AMPL (ampl.exe), una utilidad llamada "scrolling-window utility" (sw.exe), ejecutables para dos solucionadores: MINOS 5.5 (minos.exe) y CPLEX 8.0 (cplex.exe y cplex80.dll), y el cliente Kestrel (kestrel.exe) que provee acceso gratuito a más de una docena de solucionadores vía internet.

Para correr AMPL con estos archivos haga doble click sobre `sw.exe` y escriba `ampl`, en la ventana que aparece, para cargar el programa AMPL. La ventana se debe ver de la siguiente forma:

```
sw: ampl
```

```
ampl:
```

ahora puede teclear comandos en la línea como se explica en [12] o en la sección 9.4. El solucionador por defecto es MINOS. Para utilizar CPLEX teclee el comando: `option solver cplex` o `option solver kestrel` si desea utilizar el cliente Kestrel.

Unix: Para sistemas operacionales tipo Linux siga los siguientes pasos:

- a) Obtenga el archivo `.gz` apropiado para el sistema en el que desee instalar el programa.
- b) Expanda el archivo, utilizando `gzip`, para obtener uno nuevo de nombre `ampl`.
- c) Adicione el directorio donde se encuentra `ampl` al *search path* de su usuario.
- d) Otórguele permisos de ejecución al archivo `ampl`.
- e) Descargue los solucionadores que desee siguiendo el link "solver download instructions".
- f) Adicione a su *search path* la carpeta donde se encuentran los solucionadores.

Para utilizar AMPL teclee `ampl` en una ventana de terminal con línea de comandos, esta debe cambiar a

```
ampl:
```

Al finalizar estos 3 pasos la versión de estudiante de AMPL estará instalada en su computador, esta versión permite trabajar con problemas de hasta 300 variables y un total de 300 objetivos y restricciones. La versión profesional no tiene ningún límite intrínseco ni en el número de variables ni en el de objetivos y restricciones. La licencia profesional de AMPL se puede obtener a través de uno de los distribuidores que se listan en <http://www.ampl.com/vendors.html>. Para este proyecto hemos obtenido una licencia profesional de AMPL en el Departamento de Matemáticas de la Universidad de los Andes, con fines educativos y de investigación.

9.2. Solucionadores

Como se explicó en la introducción de este capítulo AMPL no resuelve los problemas de optimización directamente. AMPL se vale de solucionadores (*solvers*) para esta tarea, su tarea es entregar el modelo y los datos al solucionador especificado por el usuario y extraer la información que retorna éste.

Debido a la amplia gama de problemas de optimización (lineales, no lineales, continuos, discretos, etc ...) y a su vez a la diversidad de algoritmos de solución que se pueden utilizar para cada tipo de problemas, es necesario escoger

Solucionador	Problema	Solucionador	Problema
CPLEX	Lineal (simplex)	MINOS	Lineal (simplex) No lineal
	Lineal (interior)		
	Red		
	Cuadrático		
	Entero lineal		
	Entero cuadrático		
DONLP2	No lineal	KNITRO	No ineal

Cuadro 9.1: Algunos solucionadores que funcionan con AMPL, y los tipos de problema (algoritmo) que utilizan.

el solucionador adecuado para cada tipo de problema. A la fecha se pueden encontrar en la página de AMPL (<http://www.ampl.com/solvers.html>) 27 solvers distintos. Para ver un pequeño listado de los solucionadores que hemos utilizado remítase a el cuadro 9.1. Algunos solucionadores son de libre distribución y código abierto, otros necesitan licencias especiales para poder trabajar.

Vale la pena anotar que AMPL también puede trabajar con solucionadores desarrollados por usuarios. AMPL posee una interfaz pública y documentada que se puede utilizar para solucionadores personales. La interfaz trabaja a través de archivos; AMPL escribe un archivo con el problema que debe ser leído por el solucionador que escribe un archivo de solución que lee AMPL. El formato de éste archivo tiene versiones equivalentes en binario y ASCII. Esta característica ofrece la flexibilidad necesaria para soportar una gran variedad de solucionadores.

La interfaz de AMPL se puede encontrar en la siguiente página web:

<http://www.ampl.com/REFS/abstracts.html#hooking2>. También es posible descargar rutinas estándar de interfaz (en C) para leer y escribir los archivos formateados de AMPL, ir a <http://www.ampl.com/hooking.html> para más detalles.

Para indicarle a AMPL que se desea trabajar con un solucionador particular de nombre *nombre_solucionador* se utiliza la siguiente sintaxis en la línea de comandos (antes de solucionar el problema):

```
ampl: option solver nombre_solucionador
```

La documentación para cada solucionador se puede encontrar con el distribuidor particular de cada uno, o en algunos casos en la página web de AMPL.

9.3. Elementos de Modelaje

Para poder trabajar con AMPL se debe correr el programa escribiendo el comando *AMPL* en una línea de comandos como se describió en 9.1. Si se está utilizando una interfaz de texto lo primero que se debe ver en ésta, inmediatamente se haya ejecutado AMPL, es:

```
ampl:
```

Una vez se esté en esta situación AMPL está listo para interpretar sus comandos.

Como en la mayoría de programas que interpretan comandos AMPL espera hasta que se presione la tecla “enter” o “return” para procesar lo que se ha escrito en la línea.

Todo comando de AMPL finaliza con un punto y coma (;). Si usted teclea uno o más comandos completos en una línea AMPL los procesa, imprime los mensajes apropiados y retorna la línea de comandos `ampl:` nuevamente. Si usted finaliza (presionando “enter” sin haber escrito “;”) una línea sin haber terminado el comando, AMPL lo invita a finalizar este en la siguiente línea; esta invitación se puede identificar porque la nueva línea de comandos que se le presenta termina en una interrogación y no en dos puntos:

```
ampl?
```

El número de caracteres que se pueden teclear en una línea de comandos está limitado por el sistema operacional particular que se esté utilizando y se pueden utilizar tantas líneas como sea necesario para completar un comando.

AMPL trabaja principalmente con dos tipos de archivos:

- El archivo donde se encuentra el modelo (identificado generalmente por tener una extensión `.mod`).
- Un archivo opcional donde se le indican los valores numéricos de los diferentes parámetros y los elementos de los conjuntos requeridos por el modelo. Este archivo generalmente tiene extensión `.dat`.

El primer archivo define el *modelo* del problema a resolver. Este modelo debe seguir unas reglas de sintaxis bien definidas. Una de las grandes ventajas de trabajar con AMPL es que la sintaxis para escribir modelos es muy parecida a la sintaxis que se utiliza en la formulación algebraica de los problemas de optimización. El segundo archivo le indica a AMPL qué elementos hacen parte de los conjuntos o los valores de los parámetros que se definen en el modelo del problema. La opción de poder definir un modelo simbólicamente y definir los valores particulares para un tipo de problema hace que AMPL sea muy versátil en el sentido que un sólo modelo bien definido puede ser utilizado para resolver diferentes tipos de problemas cambiando solamente el archivo de datos.

Existen varios comandos que utilizan nombres de archivos para leer o escribir información. El nombre de un archivo puede ser una secuencia cualquiera de caracteres (excepto por el punto y coma ; o comillas ' o "). Las reglas que determinan la correcta escritura de los nombres de los archivos están determinadas por el sistema operacional.

Para finalizar una sesión de AMPL se puede utilizar el comando `end` o `quit`.

9.3.1. Carga y solución de modelos y datos

Para aplicar un solucionador a un modelo en particular se deben utilizar los comandos `model`, `data` y `solve`:

```
ampl: model transp.mod; data assign.dat; solve
CPLEX 8.0.0: optimal solution; objective 28
24 dual simplex iterations (0 in phase I)
```

El comando `model` carga un archivo que contiene las especificaciones del modelo, el comando `data` carga otro archivo que contiene los valores para los componentes del modelo. El comando `solve` hace que se le envíe una descripción del modelo a un solucionador y que los resultados estén listos para ser examinados.

AMPL mantiene un único modelo en memoria que se enviará al solucionador cuando se utilice el comando `solve`. Al comenzar una sesión el modelo está vacío. El comando `model` lee declaraciones de un archivo y las añade al modelo actual; el comando `data` lee declaraciones de un archivo que proporciona valores a componentes que ya están en el modelo. Esto permite utilizar varias veces el comando `model` o `data` para construir una descripción de un problema de optimización a partir de diferentes archivos.

Es posible declarar partes del modelo o asignar valores a los componentes directamente por la línea de comandos. Pero dado que los comandos que definen partes del modelo o asignan valores son parecidos hay que indicarle a AMPL qué tipo de comando (de modelo o de datos) se está tecleando. Por defecto AMPL está en modo *model*, el comando `data` (sin ser seguido del nombre de un archivo) cambia a modo *data* y el comando `model` (sin ser seguido del nombre de un archivo) retorna al modo *model*.

Si un modelo declara más de una función objetivo AMPL, por defecto, las pasa todas al solucionador. La mayoría de solucionadores sólo trabajan con una función objetivo y generalmente seleccionan la primera de ellas por defecto. El comando `objective` permite seleccionar una de las funciones objetivo del modelo para ser entregada al solucionador; la sintaxis de este comando es la palabra clave `objective` seguido de un nombre definido en una declaración de tipo `minimize` o `maximize`:

```
ampl: objective Nombre_función
```

El comando `solve` pone en marcha una serie de actividades:

1. Hace que AMPL genere un problema de optimización específico a partir del modelo y los datos que se le han entregado. Si hacen falta datos o el modelo está incompleto imprime un mensaje de error. También se generan mensajes de error si los datos violan alguna restricción impuesta por el modelo. Errores aritméticos, como división por 0, son detectados, también, en este momento.
2. AMPL entra en una etapa de pre-solución que intenta simplificarle el problema al solucionador. En algunos casos la pre-solución detecta la imposibilidad de encontrar una solución óptima, imprime un mensaje de error explicativo y no envía el problema al solucionador.
3. Se envía el problema (posiblemente simplificado) al solucionador por defecto o el escogido por el usuario. A menos que el usuario provea valores iniciales para las variables a encontrar, AMPL no le envía puntos iniciales al solucionador excepto si ya se ha invocado el comando `solve` previamente. En este caso AMPL utiliza las soluciones que se encontraron y

las utiliza como puntos iniciales. Para evitar que AMPL envíe soluciones previas como puntos iniciales se debe utilizar el comando `reset`. Este comando elimina el modelo de memoria.

4. AMPL imprime los mensajes que envía el solucionador (la cantidad de mensajes se puede ampliar o reducir modificando las opciones particulares de cada solucionador) y entra en una etapa de post-proceso donde está listo a recibir comandos para imprimir datos tecleados por el usuario.

AMPL le permite al usuario cambiar los valores de los elementos del modelo y formatear de diferentes formas los resultados que se obtienen al solucionar el problema particular; para una descripción detallada de estas posibilidades remitimos al lector a la referencia [12] en particular los capítulos 11-14.

9.4. Herramientas y Comandos

La notación matemática nos permite escribir de forma compacta la forma general, o modelo, de un problema de optimización utilizando notación algebraica para describir los objetivos y las restricciones que componen el problema.

Todo problema de optimización se puede describir utilizando los siguientes elementos matemáticos:

- **Conjuntos.**
- **Parámetros,** elementos conocidos y estáticos que forman parte del problema.
- **Variables,** cuyos valores deben ser determinados por el solucionador.
- **Objetivos,** funciones de los parámetros y las variables que deben ser minimizados o maximizados.
- **Restricciones** que deben ser satisfechas por la solución.

Por ejemplo, el problema de transporte (lineal) descrito en 9.5.1 se puede escribir en notación matemática de la siguiente forma:

Dados:	$ORIG,$	un conjunto de orígenes	
	$DEST,$	un conjunto de destinos	
	$s_i \geq 0,$	cantidad de bienes disponibles,	$i \in ORIG$
	$d_j \geq 0,$	demanda de bienes,	$j \in DEST$
	$c_{ij} > 0,$	costo de transporte de bienes,	$i \in ORIG$ $j \in DEST$
Defina:	$T_{ij} \geq 0$	cantidad de prod. a transportar	$i \in ORIG$ $j \in DEST$
Minimize:	$\sum_i \sum_j c_{ij} * T_{ij}$		
Sujeto a:	$\sum_j T_{ij} = s_i$	$\forall i \in ORIG,$	$j \in DEST$
	$\sum_i T_{ij} = d_j$	$\forall j \in DEST,$	$i \in ORIG$

Este modelo describe un número infinito de problemas de optimización relacionados. Si se proveen valores específicos para los elementos que se suponen conocidos el modelo se transforma en un problema específico. Cada conjunto diferente de datos define una situación única.

Un modelo matemático es, usualmente, la forma más compacta y clara de expresar un problema de optimización y además, una vez se tiene la formulación, la traducción a un lenguaje de programación se facilita.

El lenguaje de programación AMPL está diseñado para que sus comandos sean lo más parecido a una formulación matemática posible sin que sea necesario algo más que un teclado común. Existen construcciones en AMPL para definir todos los componentes básicos que se mencionaron anteriormente (conjuntos, parámetros, variables, objetivos y restricciones), además de formas para escribir expresiones aritméticas, sumas sobre conjuntos, etc.

9.4.1. Comandos de modelaje

Las declaraciones de los elementos del modelo tienen la siguiente forma común:

elemento nombre alias_{opc} indexamientos_{opc} cuerpo_{opc} ;

donde *nombre* es un nombre alfanumérico que no ha sido asignado previamente a otra entidad por una declaración, *alias* es un literal opcional, *indexamientos* es una expresión opcional de indexamiento y *elemento* es una de las siguientes palabras claves

```
set
param
var
arc
minimize
maximize
subject to
node
```

El *elemento* puede ser omitido, en cuyo caso se asume *subject to*. El *cuerpo* de varias declaraciones consiste de otras frases, la mayoría opcionales, que siguen la parte inicial (condiciones, etc.). Toda declaración debe ser finalizada por un punto y coma.

Las declaraciones pueden aparecer en cualquier orden, salvo por la condición que cada nombre debe ser declarado antes de ser utilizado.

El conjunto, (*set*), es el componente fundamental de los modelos de AMPL. En general, los parámetros, variables y restricciones están indexados sobre algún conjunto y muchas expresiones contienen operaciones (usualmente sumas) sobre conjuntos. El indexamiento sobre conjuntos es lo que permite que un modelo conciso describa un programa matemático extenso.

AMPL ofrece una amplia variedad de tipos de conjuntos y operaciones. Los miembros de un conjunto pueden ser cadenas de caracteres o números, ordenados

o desordenados; pueden aparecer como individuos, parejas ordenados, tripletes o tuplas más grandes. Los conjuntos se pueden definir listando sus miembros o computándolos explícitamente, utilizando operaciones como unión o intersección sobre otros conjuntos, o especificando operaciones matemáticas o lógicas arbitrarias como condiciones de pertenencia.

Cualquier componente de un modelo u operación iterativa se puede indexar sobre cualquier conjunto, utilizando una forma estándar de indexar expresiones. Incluso los mismos conjuntos se pueden declarar en colecciones indexadas sobre otros conjuntos.

AMPL permite cuatro operaciones que definen un nuevo conjunto a partir de dos existentes:

```
A union B
A inter B
A diff B
A symdiff B
```

donde union define un nuevo conjunto con los elementos de A y B; inter retorna elementos que estén en A y B; diff los que están en A pero no en B y symdiff los que están en A o en B pero no en los dos. Para una descripción mas extensa y detallada de las posibilidades y operaciones sobre conjuntos referimos al lector a los capítulos 5 y 6 de [12].

Un modelo de optimización extenso utiliza, sin lugar a dudas, una gran cantidad de valores numéricos. Como se ha explicado previamente, en un modelo de AMPL, sólo es necesario hacer una descripción simbólica de estos y los valores específicos sólo tienen que aparecer en comandos separados de tipo *data*.

En AMPL un valor numérico que tenga nombre se llama un parámetro. Es posible declarar parámetros como escalares individuales pero la mayoría se definen indexados sobre vectores, matrices, o algún otro tipo de valores numéricos indexados sobre conjuntos.

Los parámetros y otros valores numéricos son los bloques con que se construyen las expresiones que definen las funciones objetivo y las restricciones de los modelos. Además de los operadores unitarios y binarios estándar de la notación algebraica AMPL provee operadores de iteración como sum y prod y un operador condicional (if-then-else) que escoge entre dos expresiones, dependiendo de la veracidad de una tercera.

Los parámetros están pensados para que representen valores numéricos pero también pueden representar cadenas de caracteres arbitrarios o valores lógicos.

Las variables de un modelo tienen mucho en común con los parámetros numéricos. Los dos son símbolos que representan números y que se pueden utilizar en expresiones aritméticas. Los valores de los parámetros son proveídos por el usuario mientras que los valores de las variables deben ser encontrados por el solucionador.

Las funciones objetivo consisten en una de las palabras clave minimize o maximize, un nombre, dos puntos y una expresión lineal o no sobre conjuntos previamente definidos, parámetros y variables.

Las restricciones se definen con la palabra clave subject to, un nombre, dos puntos y una expresión lineal o no sobre conjuntos previamente definidos,

Estilo usual	Estilo alterno	Tipo de operandos	Tipo de resultado
if-then-else		lógico, aritmético	aritmético
or		lógico	lógico
exists forall		lógico	lógico
and	&&	lógico	lógico
not	!	lógico	lógico
<<==<>>==	<<==!=>>==	aritmético	lógico
in not in		objeto, conjunto	lógico
+ - less		aritmético	aritmético
sum prod min max		aritmético	aritmético
* / div mod		aritmético	aritmético
+ - (unario)		aritmético	aritmético
^	**	aritmético	aritmético

Cuadro 9.2: Operadores lógicos y aritméticos en orden de precedencia.

parámetros y variables. Estas se pueden definir como colecciones indexadas sobre un conjunto.

Para mayor profundidad en las definiciones de variables y restricciones vea el capítulo 8 de [12].

9.4.2. Expresiones matemáticas y lógicas

Las expresiones matemáticas de AMPL son muy parecidas a las de otros lenguajes de programación. Los números literales consisten de un signo opcional seguido por una secuencia de dígitos, que puede o no incluir un punto decimal. Al final de un número literal puede haber un exponente, formado por la letra d, D, e o E y un signo opcional seguido por dígitos (7.6639D-07).

Los literales, parámetros y variables pueden ser combinados en expresiones utilizando los operadores estándar de adición (+), resta (-), multiplicación (*), división (/) y exponenciación (^). Las convenciones comunes de aritmética aplican. El cuadro 9.2 muestra los operadores lógicos y matemáticos que maneja AMPL con diferentes sintaxis correctas para su utilización.

Otra forma de construir expresiones aritméticas es aplicando funciones a otras expresiones. Una referencia a función consiste de un nombre seguido por un argumento en paréntesis o una lista de argumentos separados por comas; cualquier expresión aritmética puede ser argumento de una función.

El cuadro 9.3 lista las funciones predefinidas que se encuentran típicamente en modelos. Adicionalmente AMPL provee funciones de redondeo y una variedad amplia de funciones que generan números aleatorios. También existe la posibilidad de importar funciones definidas por el usuario.

Finalmente, AMPL permite utilizar operadores (lógicos y matemáticos) y funciones en la definición de conjuntos, parámetros y variables. Los operadores iterativos pueden operar sobre cualquier tipo de conjunto.

<code>abs(x)</code>	valor absoluto, $ x $
<code>acos(x)</code>	coseno inverso, $\cos^{-1}(x)$
<code>acosh(x)</code>	coseno hiperbólico inverso, $\cosh^{-1}(x)$
<code>asin(x)</code>	seno inverso, $\sin^{-1}(x)$
<code>asinh(x)</code>	seno hiperbólico inverso, $\sinh^{-1}(x)$
<code>atan(x)</code>	tangente inversa, $\tan^{-1}(x)$
<code>atanh(x)</code>	tangente hiperbólica inversa, $\tanh^{-1}(x)$
<code>cos(x)</code>	coseno, $\cos(x)$
<code>cosh(x)</code>	coseno hiperbólico, $\cosh(x)$
<code>exp(x)</code>	exponencial, e^x
<code>log(x)</code>	logaritmo natural, $\ln(x)$
<code>log10(x)</code>	logaritmo base 10, $\ln_{10}(x)$
<code>max(x₁, x₂, ...)</code>	máximo (2 o más argumentos)
<code>min(x₁, x₂, ...)</code>	mínimo (2 o más argumentos)
<code>sin(x)</code>	seno, $\sin(x)$
<code>sinh(x)</code>	seno hiperbólico, $\sinh(x)$
<code>sqrt(x)</code>	raíz cuadrada, $\sqrt{x}$
<code>tan(x)</code>	tangente, $\tan(x)$
<code>tanh(x)</code>	tangente hiperbólica, $\tanh(x)$

Cuadro 9.3: Funciones aritméticas incluidas en AMPL.

9.4.3. Formato de datos

AMPL distingue dos ambientes distintos dentro de sintaxis, el de modelaje y el de datos. Las secciones anteriores trataron algunos aspectos del modelaje, sintaxis y funciones matemáticas. El objetivo de esta sección es presentar, de una forma introductoria, las posibilidades que ofrece AMPL para leer datos de archivos externos y los formatos que este reconoce.

AMPL puede obtener datos de archivos con una sintaxis fácil de manejar en un editor de texto cualquiera y de archivos generados por bases de datos o hojas de cálculo. El comando `display` permite obtener, en pantalla, o exportar, a un archivo, los resultados enviados por el solucionador en diferentes formatos reconocidos por AMPL y otros programas.

AMPL lee definiciones de datos en un modo *data* que se inicia con el comando `data`. La forma más común de utilización de este comando consiste en la palabra clave `data` seguida por el nombre de un archivo. Por ejemplo para leer datos de un archivo llamado `assign.dat`:

```
ampl: data assign.dat;
```

Mientras que esté leyendo en modo *data*, AMPL trata los espacios consecutivos, tabuladores y cambios de línea como un solo espacio. Las comas que separan cadenas o números también son ignoradas. Esta característica ayuda a mantener los archivos de datos en una forma legible. Al finalizar la lectura de datos AMPL retorna al modo en el que estaba previamente.

Para un parámetro sin indexamiento (escalar), el comando de datos asigna

un valor:

```
param supply := 0.8;
```

Para parámetros indexados sobre un conjunto uni-dimensional como

```
set ORIG; # origins
```

```
param supply {ORIG} >= 0;
```

la especificación del conjunto puede ser simplemente un listado de sus miembros:

```
set ORIG := Coullard Hazen Hopp Hurter;
```

y la especificación del parámetro puede ser parecida excepto por la adición de un valor después de cada miembro del conjunto:

```
param supply := Coullard 1 Hazen 0 Hopp 0 Hurter 1;
```

note que gracias a que AMPL ignora espacios consecutivos, tabuladores y cambios de línea, la especificación se habría podido escribir como:

```
param    supply :=
        Coullard    1
        Hazen       0
        Hopp        0
        Hurter      1;
```

El formateo de datos de parámetros de dos dimensiones (indexados sobre dos conjuntos) tiene una sintaxis parecida a las de una dimensión pero con cada miembro del conjunto identificado con un par de objetos. La generalización a más de dos dimensiones sigue el mismo tipo de sintaxis. Sin embargo AMPL también reconoce un formato de tipo tabla para este tipo de parámetros, por ejemplo los valores para las siguientes definiciones (note que *cost* es un parámetro bidimensional):

```
set ORIG;
```

```
set DEST;
```

```
param cost {ORIG, DEST} >= 0;
```

se puede especificar como

```
set ORIG := Coullard Hazen ;
```

```
set DEST := 1021 1049 1053 ;
```

```
param cost:
```

```
        1021  1049  1053  :=
Coullard    6    9    8
Hazen      11    8    7  ;
```

Además de permitir definir valores específicos AMPL permite definir valores por defecto para escalares o parámetros en una o más dimensiones. La sintaxis para utilizar esta posibilidad es:

```
param nombre_parámetro default valor_por_defecto ;
```

donde *valor_por_defecto* es un número.

AMPL también permite extraer datos de archivos propios de manejadores de bases de datos o hojas de cálculo. Para la descripción detallada de los comandos necesarios referimos al lector a [12], capítulos 8-10.

9.5. Ejemplos

El objetivo de esta sección es mostrar ejemplos donde se ponen en práctica la sintaxis y los comandos descritos en las secciones anteriores. Como se ha mencionado en 9.2 AMPL se vale de solucionadores para obtener las soluciones de los modelos para los datos particulares que se estén trabajando. Trataremos tres ejemplos:

- Modelo lineal de transporte.
- Modelo no lineal de transporte.
- Modelo de Bolza explicado al final de la sección 3.2.1.

Los dos primeros modelos han sido tomados directamente de [12] y hemos transcrito tanto el archivo del modelo (.mod) como el de datos .dat. En el caso del problema de Bolza hemos escrito el modelo y presentamos los resultados que obtenemos para los momentos definidos en 3.2.4.

9.5.1. Problema de Transporte

El problema de transporte es un ejemplo común de optimización donde una serie de bienes se deben transportar de varios orígenes a varios destinos de forma tal que el costo del transporte de los bienes sea mínimo. Este es uno de los ejemplos más conocidos de problemas donde se quiere minimizar el costo de algún tipo de flujo.

El problema particular que se trata en [12] consiste en transportar un bien de un conjunto de orígenes a otro. El costo de llevar el bien de un origen cualquiera a un destino cualquiera es conocido. Además hay un índice que indica la cantidad del producto en los orígenes y otro relacionado con la demanda en los destinos.

La función a minimizar depende de los costos de transporte y de las cantidades a transportar entre orígenes y destinos.

A esta función de coste se le imponen restricciones que aseguren el cumplimiento de ciertas ecuaciones que se deben cumplir.

Ejemplo: caso lineal

En este caso la función de coste es la multiplicación de la cantidad de producto a transportar de cada origen a cada destino y el costo de transportarlo. Las cantidades que se desean encontrar son las cantidades a transportar de orígenes a destinos.

El modelo tiene dos restricciones: una para asegurarse que la cantidad de producto que llega a un destino sea igual a la demanda y otra que asegure que la totalidad de producto que sale de un origen no exceda la cantidad disponible. Las restricciones también son lineales.

A continuación presentamos el archivo del modelo lineal para el problema de transporte *transp.mod*:

```
set ORIG; # origins
```

```

set DEST; # destinations
set LINKS within {ORIG,DEST};
param supply {ORIG} >= 0; # amounts available at origins
param demand {DEST} >= 0;
# amounts required at destinations
check: sum {i in ORIG}
    supply[i] = sum {j in DEST} demand[j];
param cost {LINKS} >= 0; # shipment costs per unit
var Trans {LINKS} >= 0; # actual units to be shipped
minimize total_cost:
    sum {i,j in LINKS} cost[i,j] * Trans[i,j];
subject to Supply {i in ORIG}:
    sum (i,j) in LINKS Trans[i,j] = supply[i];
subject to Demand {j in DEST}:
    sum {i,j in LINKS} Trans[i,j] = demand[j];

```

El archivo correspondiente de datos, *assign.dat*:

```

set ORIG := Coullard Hazen Hopp Hurter Jones
    Mehrotra Rieders Spearman Sun Tamhane Zazanis ;
set DEST := 1021 1049 1053 1055 1083 1087 ;
param supply default 1 ;
param demand default 1 ;
param cost:

```

	1021	1049	1053	1055	1083	1087	:=
Coullard	6	9	8	7	11	10	
Hazen	11	8	7	6	9	10	
Hopp	9	10	11	1	5	6	
Hurter	11	9	8	10	6	5	
Jones	3	2	8	9	10	11	
Mehrotra	11	9	10	5	3	4	
Rieders	6	11	10	9	8	7	
Spearman	11	5	4	6	7	8	
Sun	11	9	10	8	6	5	
Tamhane	5	6	9	8	4	3	
Zazanis	11	9	8	4	6	5	;

Ejemplo: caso no lineal

Para el caso no lineal se han introducido nuevos parámetros que aumentan la complejidad del modelo. Además de la oferta y la demanda se han incluido el costo básico de transporte por unidad de producto y un límite al número de unidades que se pueden llevar de un origen a un destino. Estas nuevas restricciones, por sí solas, no introducen no linealidad en el modelo.

La no linealidad se introduce en una nueva función coste definida como

$$r_{ij} \cdot \frac{T_{ij}}{1 - \frac{T_{ij}}{I_{ij}}}$$

donde r_{ij} representa el costo por unidad transportada del origen i al destino j , T_{ij} la cantidad de producto a transportar (variables a encontrar) y l_{ij} el límite de unidades que se pueden transportar.

Las restricciones impuestas son equivalentes a las del caso lineal.

El archivo del modelo *nitrans.mod* es:

```

set ORIG; #origins
set DEST; # destinations
param supply {ORIG} >= 0; # amounts available at origins
param demand {DEST} >= 0;
    # amounts required at destinations
check: sum {i in ORIG}
    supply[i] = sum {j in DEST} demand[j];
param rate {ORIG,DEST} >= 0; # base shipment costs per unit
param limit {ORIG,DEST} > 0; # limit on units shipped
var Trans {i in ORIG, j in DEST} >= 0, := 0; # units to ship
minimize totalcost:
    sum {i in ORIG, j in DEST}
        rate[i,j] * Trans[i,j] / (1 - Trans[i,j]/limit[i,j]);
subject to Supply {i in ORIG}:
    sum {j in DEST} Trans[i,j] = supply[i];
subject to Demand {j in DEST}:
    sum {i in ORIG} Trans[i,j] = demand[j];

```

Una posibilidad para el archivo de datos es *nitrans.dat*:

```

param: ORIG: supply :=
GARY 1400 CLEV 2600 PITT 2900 ;
param: DEST: demand :=
    FRA      900
    DET      1200
    LAN      600
    WIN      400
    STL      1700
    FRE      1100
    LAF      1000 ;

param rate :  FRA  DET  LAN  WIN  STL  FRE  LAF  :=
GARY          39   14   11   14   16   82   8
CLEV          27   9   12   9   26   95   17
PITT          24   14   17   13   28   99   20 ;

param limit:  FRA  DET  LAN  WIN  STL  FRE  LAF  :=
GARY          500 1000 1000 1000 800 500 1000
CLEV          500 800  800  800 500 500 1000
PITT          800 600  600  600 500 500 900 ;

```

Como se puede apreciar en los distintos ejemplos el lenguaje de modelaje de AMPL es bastante intuitivo y la forma de escribir los datos bastante cómoda. Proseguimos ahora a resolver el problema de Bolza utilizando las facilidades de este programa.

9.5.2. Problema de Bolza y Medidas de Young

Procedemos ahora a describir la solución del problema de optimización en el que se transformó el problema de Bolza en la sección 3.2.4. El problema de Bolza se enuncia como minimizar el funcional

$$J(u) = \int_0^1 (1 - u'(x)^2)^2 + u(x)^2 dx, \quad (9.1)$$

bajo las condiciones de frontera

$$u(0) = u(1) = 0. \quad (9.2)$$

Debemos encontrar las funciones $u(x)$ que minimizan $J(u)$.

Aplicando el método de los momentos llegamos a que el problema en términos de momentos se podía escribir de la siguiente forma si tomamos una malla de 10 puntos:

$$J_d(m) = \sum_{i=1}^{10} \left[1 - 2m_3(x_i) + m_4(x_i) + \left(\sum_{j=1}^i m_1(x_j) \Delta x \right)^2 \right] \Delta x \quad (9.3)$$

donde

$$\Delta x = \frac{1}{10}.$$

Manteniendo la condición de frontera

$$\sum_{i=1}^{10} m_1(x_i) \Delta x = 0, \quad (9.4)$$

e imponiendo las condiciones sobre la matriz de Hankel que forman los momentos $m_j(x_i)$

$$\begin{aligned} m_3(x_i) &\geq m_1(x_i)^2 \\ m_4(x_i) &\geq m_3(x_i)^2 \\ m_3(x_i)m_4(x_i) &\geq m_3(x_i)^3 \\ m_3(x_i)m_4(x_i) + 2m_1(x_i)m_3(x_i)m_3(x_i) - m_3(x_i)^3 - \\ &\quad - m_3(x_i)^2 - m_1(x_i)^2m_4(x_i) \geq 0. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Este es un problema de optimización convexo pero no lineal que AMPL puede solucionar.

El problema lo solucionamos definiendo el modelo, solamente, ya que los datos necesarios para llegar a la solución son tres escalares: el número de puntos de la malla y los valores de la función u en los extremos de la barra. Definimos los siguiente parámetros:

- N , número de puntos de la malla.

- a_1 , valor de $u(1)$.
- a_0 , valor de $u(0)$.
- D , ancho de las divisiones de la malla, $D = \Delta x$.

Dos grupos de variables distintas:

- x , la utilizaremos en la recuperación de la solución.
- m , los momentos. Están definidos sobre dos conjuntos ya que cada momento $(m_1, \dots, m_4)$ debe ser encontrado en cada punto i de la malla.

Definimos la función objetivo $J_d(m)$ (J_d) e imponemos las restricciones de la matriz de Hankel para cada punto de la malla.

El archivo que se utilizó para definir el modelo, *bolsa.mod*, es:

```
param N default 10;
param a1 default 0;
param a0 default 0;
param D = 1/N;
var x {1..N};
var m {1..4, i in 1..N};
minimize Jd:
    sum {i in 1..N} (1 - 2*m[2,i] + m[4,i] +
        (a0 + sum{j in 1..i} (m[1,j])*D)^2)*D ;
subject to FinalPoint: sum{i in 1..N} (m[1,i])*D = a1 - a0;
subject to subdet1 {i in 1..N}: m[2, i] >= (m[1, i])^2;
subject to subdet2 {i in 1..N}: m[4, i] >= (m[2, i])^2;
subject to subdet3 {i in 1..N}:
    m[2, i]*m[4, i] >= (m[3, i])^2;
subject to subdet4 {i in 1..N}:
    (m[2, i]*m[4, i] - (m[3, i])^2 - m[4, i]*(m[1, i])^2 +
        2*m[1, i]*m[2, i]*m[3, i] - (m[2, i])^3) >= 0 ;
```

Al correr este modelo se obtienen los valores de el cuadro 9.4 para los momentos $m_j(x_i)$. Si comparamos con los resultados analíticos obtenidos en la sección 3.2.4 vemos que el programa de optimización recupera fielmente la respuesta correcta.

Estos momentos nos permiten entender las sucesiones minimizantes y obtener (por un método numérico) las figuras 3.3 y 3.4.

9.5.3. Cálculo de Microestructuras

En esta sección describimos el código utilizado para solucionar el problema (4.4)-(4.6) planteado en la sección 4.2. Recordemos que este plantamiento se deriva del balance de energía (4.2) que fue propuesto para encontrar la microestructura de un acero con bajo contenido de carbono. El código en AMPL utilizado para encontrar los valores de los momentos $m_j(x_i)$, $j = 1, 2, 3, 4$, del

	$m_1(x_i)$	$m_2(x_i)$	$m_3(x_i)$	$m_4(x_i)$
x_1	0	1	0	1
x_2	0	1	0	1
x_3	0	1	0	1
x_4	0	1	0	1
x_5	0	1	0	1
x_6	0	1	0	1
x_7	0	1	0	1
x_8	0	1	0	1
x_9	0	1	0	1
x_{10}	0	1	0	1

Cuadro 9.4: Valores de momentos obtenidos numéricamente para el problema de Bolza utilizando AMPL.

problema previamente mencionado es (se han tomado 20 puntos en el intervalo de interés):

```

param N default 20;
param a1 default 0.25;
param a0 default 0;
param D = 1/N;
var x {1..N};
var m {1..4, i in 1..N};
minimize Jd:
  sum {i in 1..N} ( 508.319 * m[2,i] - 1554.87 * m[3,i] +
    1548.97 * m[4,i] + abs (a0 + sum {j in 1..i} (m[1,j])*D) ) * D;
subject to FinalPoint: sum {i in 1..N} (m[1,i])*D = a1 - a0;
subject to subdet1 {i in 1..N}: m[2, i] >= (m[1, i])^2;
subject to subdet2 {i in 1..N}: m[4, i] >= (m[2, i])^2;
subject to subdet3 {i in 1..N}:
  m[2, i]*m[4, i] >= (m[3, i])^2;
subject to subdet4 {i in 1..N}:
  (m[2, i]*m[4, i] - (m[3, i])^2 - m[4, i]*(m[1, i])^2 +
    2*m[1, i]*m[2, i]*m[3, i] - (m[2, i])^3) >= 0 ;

```

El solucionador utilizado para tratar este problema fue *KNITRO*TM, un solucionador para problemas de optimización no lineal que utiliza un algoritmo de tipo interior (o de barrera). Para mayor información consultar la página web <http://www.ziena.com/knitro.html>. Las opciones del solucionador que se utilizaron fueron:

```
ampl: option knitro_options "direct = 1 maxit = 5000";
```

Este código nos proporciona los valores de los momentos del cuadro 4.1 a partir de los cuales encontramos los pesos y soportes del cuadro 4.2 que finalmente nos lleva a proponer las sucesiones minimizantes que mostramos en la figura 4.2.

Capítulo 10

Herramientas Computacionales Para Calcular Microestructuras: GAMS

GAMS (*General Algebraic Modeling Software*) es un sistema de modelaje de alto nivel para problemas de programación matemática. GAMS está diseñado para manejar modelos complejos de gran escala y permite adaptarlos rápidamente a situaciones nuevas. Este programa está compuesto por un compilador y un conjunto de solucionadores integrados. A grandes rasgos es un lenguaje de modelaje algebraico para problemas de optimización lineales y no lineales, en variables continuas o discretas. GAMS permite que el usuario utilice un lenguaje algebraico para plantear modelos de optimización y examinar soluciones.

Entre las características de GAMS cabe destacar lo siguiente,

1. Su capacidad para pasar de resolver problemas de pequeña dimensión (docenas de variables y restricciones) a problemas mayores (miles de variables y restricciones) sin necesidad de variar el código sustancialmente. El manejo eficiente de sus índices permite escribir de manera compacta restricciones similares mediante una sola expresión.
2. Separa el proceso de modelado del proceso de resolución del problema. Así, el usuario de GAMS debe ser capaz de conseguir una formulación consistente del problema, y una vez esté expresada en la notación de GAMS, este lenguaje hace uso de alguno de los optimizadores disponibles para obtener su solución. De esta manera, el usuario sólo ha de centrarse en obtener un modelo del problema y en principio no debe preocuparse por desarrollar el código de optimización.
3. La forma en que GAMS representa un problema de optimización coincide

con la descripción matemática estándar de éste.

4. Además, GAMS proporciona los mecanismos necesarios para resolver problemas de optimización con estructuras similares, como son aquellos que se derivan de las técnicas de descomposición.

Como se puede observar, al igual que AMPL, GAMS es una interfaz entre el usuario y el solucionador, está soportada en un ambiente de comandos que permite la solución de problemas de programación matemática.

La versión de evaluación de GAMS y algunos solucionadores se pueden encontrar de manera gratuita en la página Web: www.gams.com, y es posible instalarlo en plataformas Windows y sistemas operativos basados en Unix.

Para la instalación y una descripción detallada de los comandos propios y los elementos de modelaje referimos al lector a [13]. A continuación damos algunos ejemplos de problemas que se pueden tratar con GAMS.

10.1. Ejemplos

En esta sección se presentan tres ejemplos diferentes con el objetivo de ilustrar de manera adecuada el desarrollo de los programas matemáticos en GAMS.

Los tres ejemplos corresponden a un caso lineal, un caso no lineal y el problema de Bolza descrito en el capítulo 3. El caso lineal es el conocido problema de la dieta y el no lineal el del paquete postal, ambos han sido tomados de [13].

El Problema de la dieta

El problema de la dieta consiste en determinar las cantidades de distintos nutrientes que deben ingerirse para asegurar ciertas condiciones de nutrición y minimizar el costo de compra de los nutrientes. En otras palabras se conocen los contenidos nutritivos de ciertos alimentos, sus precios y la cantidad mínima diaria que se debe consumir. El problema consiste en determinar la cantidad de alimento que debe comprarse para que se satisfagan los mínimos aconsejados y se alcance el mínimo precio total posible que mantenga las restricciones previas. Este problema fue tomado de [13].

Se define un programa matemático lineal de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 &\text{Minimizar } Z = \sum_{j=1}^n c_j x_j \\
 &\text{sujeto a } \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \geq b_i \quad i = 1, \dots, m \\
 &\quad \quad \quad x_j \geq 0, \quad j = 1, \dots, n
 \end{aligned} \tag{10.1}$$

donde $m = 4$, $n = 5$ y

$$A = \begin{bmatrix} 78,6 & 70,1 & 80,1 & 67,2 & 77 \\ 6,5 & 9,4 & 8,8 & 13,7 & 30,4 \\ 0,02 & 0,09 & 0,03 & 0,14 & 0,41 \\ 0,27 & 0,34 & 0,30 & 1,29 & 0,86 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 74,2 \\ 14,7 \\ 0,14 \\ 0,55 \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} 1 \\ 0,5 \\ 2 \\ 1,2 \\ 3 \end{bmatrix}$$

La codificación de este programa matemático se muestra a continuación.

**** Se declara y define la matriz de datos como una tabla**

Table a(i,j) cantidad de nutriente i por unidad de alimento j

	MaizA	Avena	MaizB	Salvado	Carne
DN	78.6	70.1	80.1	67.2	77.0
DP	6.5	9.4	8.8	13.7	30.4
Ca	0.02	0.09	0.03	0.14	0.41
Ph	0.27	0.34	0.30	1.29	0.86;

**** A continuación se declaran las variables de optimización**

**** Se declara el valor de la función objetivo**

**** Se declara el resto de variables indicando su dimensión**

Variables

z Valor de la función objetivo
x(j) Cantidad a comprar del alimento j;

****El comando siguiente establece la naturaleza de las variables**

****Se asumen todas las variables positivas**

Positive Variable x(j);

****Se declaran las ecuaciones del problema**

equations

costo Función objetivo
relac Relacion entre nutrientes y alimentos;

costo.. z=e=sum(j,c(j)*x(j));
relac(i).. sum(j,a(i,j)*x(j))=g=b(i);

****Declaración del modelo de la dieta**

Model dieta /all/;

Solve dieta using lp minimizing z;

Display x.l;

El resultado que muestra el archivo de salida (Dieta.lst) que se transcribe a continuación:

Avena 1.530, Salvado 0.023 \\\

En el archivo de salida cuando GAMS no muestra los resultados, estos deben asumirse cero. En el ejemplo anterior no se muestra el resultado para Maiza, ni para MaizB, ni para Carne, por lo tanto la solución óptima en el problema de la dieta es:

$$(\text{MaizA}, \text{Avena}, \text{MaizB}, \text{Salvado}, \text{Carne}) = (0, 153, 0, 0.023, 0)$$

Para un costo de $Z = 0,793$.

El problema del paquete postal

Como ejemplo de solución de programas no lineales tomamos este caso simple. La formulación fue tomada de [13].

Un paquete posee dimensiones x , y y z . Para ser aceptado en la oficina de correos su altura más el perímetro de la base no puede exceder los 200cm. La formulación matemática de este problema es,

$$\begin{aligned} &\text{Maximizar } Z = xyz \\ &\text{sujeto a } z + 2x + 2y \geq 200 \\ &x, y, z \geq 0 \end{aligned} \tag{10.2}$$

La codificación en GAMS es de la siguiente forma:

```
$title PROBLEMA DEL PAQUETE POSTAL

**Definición de la variable de la función objetivo
Variable          obj;

**Definición de las variables de optimización
Positive variables x,y,z;

**Definición de las ecuaciones
equations
    vol    Volumen del paquete
    per    Restricción de perimetro;

vol..    obj =e=x*y*z;
per..    z+2*x+2*y =l= 200;

**Definición del modelo
Model postal /all/;

**Establecer puntos iniciales de variables de diseño
x.l=1; y.l=1; z.l=1;
```

```

**Resolver usando programación no lineal
Solve postal using nlp maximizing obj;
**Muestra los resultados de las dimensiones
Display x.l;
Display y.l;
Display z.l;

```

El programa tiene como resultados $x = 33,333$, $y = 33,333$, y $z = 66,667$, lo que da un volumen de 74072,963.

10.2. Problema de Bolza y Medidas de Young

El problema de Bolza se resume en:

$$\text{Minimizar } \int_0^1 ((1 - u'(x))^2 + u(x)^2) dx \quad (10.3)$$

Con condiciones de frontera $u(0) = a_0$ y $u(1) = a_1$.

Al aplicar el método de los momentos y discretizarlo de una forma apropiada se transforma el problema en,

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } \sum_{i=1}^n \left(1 - m_2(x_i) + m_4(x_i) + \left(u_0 + \sum_{j=1}^i m_1(x_j) \Delta x_j \right)^2 \right) \Delta x_i \\ &\text{sujeto a } \begin{bmatrix} 1 & m_1(x) & m_2(x) \\ m_1(x) & m_2(x) & m_3(x) \\ m_2(x) & m_3(x) & m_4(x) \end{bmatrix} \geq 0 \\ &\quad \sum_{i=1}^n m_1(x_i) \Delta x_i = a_1 - a_0 \end{aligned} \quad (10.4)$$

Donde n es el número de puntos de la malla discreta, a_0 es la condición inicial $u(0)$, a_1 es la condición final $u(1)$. Y además,

$$\Delta x_i = \frac{1}{n}$$

Para implementar este problema en GAMS es necesario dividir la matriz de momentos (Matriz de Hankel) en sus subdeterminantes.

A continuación se muestra el código en GAMS, comentado, el método de solución para una malla con $n = 20$ y condiciones iniciales $a_0 = 0$ y $a_1 = 0,25$.

```
$title PROBLEMA DE BOLZA UNIDIMENSIONAL
```

```

**Definición de conjuntos
** i: Indice que recorre las filas de la matriz de Hankel
** j: Indice que recorre las columnas de la matriz de Hankel

```

```

** k: Indice auxiliar
Sets
    j      Parametros de las filas /1*20/
    i      Parámetros de las columnas /1*4/
    alias  (j,k);

**Definición de las constantes Parameters
    N      Número de puntos en la malla /20/
    a1     Condición de frontera final  /0.25/
    a0     Condición de frontera inicial /0/
    h      Tamaño de paso  /0.05/;

**Definición de las variables
** m: Matriz de momentos
** z: Variable asociada a la función objetivo
Variables
    m(i,k) Momentos
    z      Definicion de función objetivo;

**Definición de las ecuaciones
** obj: Ecuación de la función objetivo
** ci: Restricción de las condiciones iniciales
** restr: Restricciones dadas por la matriz de Hankel,
** dado que debe ser semidefinida positiva
Equations
    obj      Función objetivo
    ci      Restriccion de las condiciones iniciales
    restr1(k) Restricción de determinante 1
    restr2(k) Restricción de determinante 2
    restr3(k) Restricción de determinante 3
    restr4(k) Restricción de determinante 4;

ci..      sum(k, m('1',k))*h =e= a1-a0;
restr1(k).. m('2',k) =g= (power(m('1', k),2));
restr2(k).. m('4', k) =g= (power(m('2', k),2));
restr3(k).. (m('2', k)*m('4',k)) =g= (power(m('3',k),2));
restr4(k).. (m('2',k)*m('4',k) - power(m('3',k),2)
             - m('4',k)*(power(m('1',k),2)) + 2*m('1',k)*m('2',k)*
             m('3',k) - power(m('2',k),3)) =g= 0;
obj..      z =e=(sum(k,1-2*m('2',k)+m('4',k)
             +power(a0+sum(j$(ord(j) le ord(k)), m('1',j))*h,2))*h;

**Declaración del modelo de Bolza
Model bolza /all/;
**Ir al solucionador
Solve bolza using nlp minimizing z;

```

Display m.1;

Al correr esta rutina se obtienen los resultados mostrados en el cuadro 10.1, si se interpretan los valores de este cuadro vemos que para este tipo de condiciones no hay minimizadores y que hay dos regiones distintas: una en que se observa una oscilación y otra donde tenemos una recta. En este caso las medidas parametrizadas óptimas son:

$$\mu_x^* = \begin{cases} \frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1 & \text{en } 0 \leq x \leq 0,75 \\ \delta_1 & \text{en } x > 0,75 \end{cases} \quad (10.5)$$

Para cambiar las condiciones iniciales del problema basta con modificar los parámetros asociados (a_0 y a_1). En el cuadro 10.2 se muestran los resultados cuando $a_0 = 0$ y $a_1 = 1$. De estos resultados podemos observar que para este tipo de condiciones existe minimizador del problema original. La medida óptima está soportada en un solo punto y nos dice que el minimizador u debe cumplir $\frac{du}{dx} = 1$ para todo x . En este caso tenemos

$$\mu_x^* = \delta_1 \quad (10.6)$$

Por último, para mostrar la alternancia probamos la rutina de GAMS con $a_0 = 0$ y $a_1 = 0$, los resultados se muestran en la tabla 10.3. La medida óptima es, en este caso,

$$\mu_x^* = \frac{1}{2}\delta_{-1} + \frac{1}{2}\delta_1 \quad (10.7)$$

para todo x . Tenemos oscilaciones persistentes y por lo tanto no existe minimizador en este caso. Las sucesiones minimizantes deben alternar, con igual proporción, su pendiente entre ± 1 .

De esta forma mostramos que GAMS es una buena herramienta computacional para el análisis de microestructuras, debido a las facilidades computacionales para resolver programas matemáticos en altas dimensiones.

$m_1^*(x)$	$m_2^*(x)$	$m_3^*(x)$	$m_4^*(x)$
-5.2873e-007	1	9.7636e-006	1
-5.2415e-006	1	1.5409e-005	1
2.7054e-005	1	-1.3453e-005	1
-2.3120e-007	1	1.1036e-005	1
2.1064e-005	1	-1.1614e-005	1
-2.0512e-005	1	2.9397e-005	1
-6.7116e-006	1	1.6122e-005	1
-3.8201e-006	1	1.3985e-005	1
4.1671e-005	1	-3.0797e-005	1
-2.8868e-005	1	3.8528e-005	1
3.6141e-006	1	6.3120e-006	1
-4.3990e-006	1	1.3847e-005	1
1.7074e-006	1	2.0311e-005	1
7.1303e-004	1	6.9917e-004	1
0.0940	1	0.0940	1
0.9100	1	0.9100	1
0.9900	1.0010	0.9910	1.0030
0.9980	1.0040	1.0020	1.0080
1.0020	1.0080	1.0090	1.0150
1.0050	1.0130	1.0180	1.0250

Cuadro 10.1: Resultado al problema de Bolza con $a_0 = 0$ y $a_1 = 0,25$

$m_1^*(x)$	$m_2^*(x)$	$m_3^*(x)$	$m_4^*(x)$
0.3330	1	0.3330	1
0.9840	1	0.9840	1.0010
0.9980	1.0020	1	1.0040
1.0010	1.0050	1.0050	1.0100
1.0040	1.0090	1.0130	1.0180
1.0060	1.0140	1.0210	1.0290
1.0100	1.0210	1.0310	1.0420
1.0140	1.0290	1.0430	1.0580
1.0180	1.0380	1.0570	1.0770
1.0230	1.0480	1.0720	1.0980
1.0290	1.0590	1.0890	1.1210
1.0350	1.0710	1.1080	1.1470
1.0410	1.0840	1.1290	1.1760
1.0480	1.0990	1.1520	1.2070
1.0550	1.1140	1.1760	1.2410
1.0630	1.1300	1.2020	1.2780
1.0710	1.1480	1.2290	1.3170
1.0800	1.1660	1.2590	1.3590
1.0890	1.1850	1.2900	1.4040
1.0980	1.2050	1.3230	1.4520

Cuadro 10.2: Resultado al problema de Bolza con $a_0 = 0$ y $a_1 = 1$

$m_1^*(x)$	$m_2^*(x)$	$m_3^*(x)$	$m_4^*(x)$
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1
0	1	0	1

Cuadro 10.3: Resultado al problema de Bolza con $a_0 = 0$ y $a_1 = 0$

Capítulo 11

Programación Semidefinida, Envolturas Convexas y Optimización Global

11.1. Envolturas Convexas y Optimización Global

Una de las herramientas fundamentales para el desarrollo de este trabajo es el adecuado uso de un nuevo paradigma en programación convexa: la *programación semidefinida*. Éste es un conjunto particular de programas matemáticos convexos que se describen de una manera muy apropiada empleando desigualdades matriciales. Supongamos que nuestras variables de diseño $x_1, \dots, x_k$ se restringen de la siguiente manera: formamos una combinación lineal de matrices

$$A_0 + x_1 A_1 + \dots + x_k A_k \quad (11.1)$$

donde las matrices $A_0, \dots, A_k$ son matrices simétricas dadas por los parámetros del problema y exigimos que la matriz resultante (11.1) sea semidefinida positiva. Esto define un conjunto factible convexo en el espacio euclideo $\mathbb{R}^k$. Como función objetivo tomaremos una expresión lineal en las variables de diseño: $c \cdot x$. Este tipo de programas no lineales utilizan un formalismo análogo al formalismo de programación lineal pero empleando la geometría de conos convexos. El lector puede observar que si suprimimos la matriz A_0 en (11.1) obtendremos un cono convexo en $\mathbb{R}^k$. Para el tratamiento numérico de estos problemas se acude a la teoría de funciones de barreras conjugadas. El lector puede encontrar una buena introducción a este tema en [43].

Dentro de nuestro trabajo de investigación la programación semidefinida es una herramienta primordial en el tratamiento de problemas de optimización global, en el análisis de envolturas convexas, en el tratamiento de relajaciones semidefinidas y en el estudio de envolturas policonvexas. Sin embargo también

señalamos que no es ella nuestro objeto de estudio sino el camino para lograr algunos de los objetivos propuestos.

En primer lugar, como explicamos con detalle en el Capítulo 5, cuando nos enfrentamos al estudio de una envoltura convexa descrita por un polinomio bidimensional:

$$f(x, y) = \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j} x^i y^j \quad (11.2)$$

podemos aplicar resultados que extienden al teorema de Caratheodory en análisis convexo, para convertir el cálculo del valor de la envoltura convexa $f_c(s, t)$ en un problema de optimización en medidas de probabilidad como:

$$\begin{aligned} \min_{\mu \in \mathcal{P}(\mathbb{R}^2)} \iint_{\mathbb{R}^2} f(x, y) d\mu(x, y) \\ \text{s. a.} \\ \iint_{\mathbb{R}^2} (x, y) d\mu(x, y) = (s, t) \end{aligned} \quad (11.3)$$

por lo cual el problema puede replantearse como

$$\begin{aligned} \min_m \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j} m_{i,j} \\ \text{s. a.} \\ (m_{1,0}, m_{0,1}) = (s, t), \end{aligned} \quad (11.4)$$

y además las restricciones que garantizan que los valores $m_{i,j}$ sean momentos bivariados. Esta nueva condición nos lleva a investigar qué condiciones debemos imponer en m para que sus componentes $m_{i,j}$ sean los momentos algebraicos de una distribución de probabilidad bivariada.

Es así como hemos propuesto las matrices de restricción. Las cuales provienen de la forma cuadrática correspondiente a tomar el cuadrado en un polinomio bidimensional de grado n :

$$\left(\sum_{0 \leq i+j \leq n} c_{i,j} x^i y^j \right)^2 = \sum_{0 \leq i+j \leq n} \sum_{0 \leq i'+j' \leq n} c_{i,j} c_{i',j'} x^{i+i'} y^{j+j'} \quad (11.5)$$

de donde obtenemos explícitamente la acción de la forma cuadrática:

$$c \rightarrow \sum_{0 \leq i+j \leq n} \sum_{0 \leq i'+j' \leq n} c_{i,j} c_{i',j'} m_{i+i', j+j'}. \quad (11.6)$$

Esta observación nos permite conocer precisamente la forma de la matriz de restricción:

$$m = (m_{i+i', j+j'} : 0 \leq i+j \leq n; 0 \leq i'+j' \leq n) \quad (11.7)$$

que debemos considerar como definida positiva para garantizar que los valores que la conforman $m_{i,j}$ representan adecuadamente los momentos de una distribución de probabilidad bivariada [9, 20].

Una simple inspección de la matriz de restricción (11.7), nos mostrará que sus variables internas pueden considerarse como las variables de diseño en un programa semidefinido, donde su conjunto factible admite la descripción (11.1) en forma de una desigualdad lineal de matrices o LMI (linear matrix inequalities). Por lo tanto el análisis de la envoltura convexa del polinomio bidimensional f comienza con el estudio del programa semidefinido:

$$\begin{aligned} \min_m \quad & \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j} m_{i,j} \\ \text{s.a.} \quad & (m_{1,0}, m_{0,1}) = (s, t) \\ m = & (m_{i+i', j+j'} : 0 \leq i+j \leq n; 0 \leq i'+j' \leq n) \end{aligned} \quad (11.8)$$

con m semidefinida positiva.

Como veremos en la siguiente sección, contamos con rutinas especializadas para abordar este tipo de problemas [14]. Es importante señalar que no basta con resolver este tipo de programas matemáticos para dar respuesta a los objetivos de nuestro trabajo. Puesto que el análisis de la envoltura convexa de f en el punto particular $\vec{X} = (s, t)$, consiste en determinar los puntos $\vec{A}$, $\vec{B}$ y $\vec{C}$ del plano y los valores positivos p_1 , p_2 y p_3 que proporcionan la combinación convexa propia del teorema de Caratheodory:

$$f(\vec{X}) = p_1 f(\vec{A}) + p_2 f(\vec{B}) + p_3 f(\vec{C}) \quad (11.9)$$

$$\vec{X} = p_1 \vec{A} + p_2 \vec{B} + p_3 \vec{C} \quad (11.10)$$

$$1 = p_1 + p_2 + p_3, \quad (11.11)$$

podemos encontrar esta información implementando un cuidadoso procedimiento algebraico sobre los valores óptimos $m_{i,j}^*$ que resultan de un adecuado tratamiento del programa semidefinido (11.8) (ver Capítulo 5). Esta información es justamente la que nos permite identificar la alternancia entre gradientes y en últimas la microestructura de un material cuando estamos realizando la labor, más compleja, de analizar modelos variacionales en elasticidad a través de relajaciones semidefinidas.

Por otra parte, cabe destacar que el análisis de la envoltura convexa de una función f permite resolver problemas de optimización global dados en la forma general:

$$\min_{t \in \Omega} f(t) \quad (11.12)$$

donde no existe ningún presupuesto acerca de la geometría de f ni de Ω . Empleando el mismo tipo de análisis que proviene del teorema de Caratheodory, utilizando técnicas de análisis convexo, podemos mostrar que el problema de

optimización global (11.12) es equivalente al problema de optimización en medidas:

$$\min_{\mu \in P(\Omega)} \int_{\Omega} f(s) d\mu(s) \quad (11.13)$$

donde $P(\Omega)$ representa la familia de distribuciones de probabilidad soportadas en Ω . En este contexto, si G es el conjunto de mínimos globales para f en Ω , el conjunto solución para el problema relajado (11.13) es $P(G)$ que corresponde a la familia de medidas de probabilidad soportadas en G . Este importante resultado, producto de esta labor de investigación, nos permite representar el problema de optimización de polinomios en la forma (11.2) como un programa semidefinido:

$$\begin{aligned} \min_m \quad & \sum_{0 \leq i+j \leq 3n} c_{i,j} m_{i,j} \\ \text{s. a.} \quad & \\ m = (m_{i+i',j+j'} : 0 \leq i+j \leq n; 0 \leq i'+j' \leq n) \geq 0 \end{aligned} \quad (11.14)$$

equivalente al problema de optimización global (11.12) [17].

Consecuentemente, daremos a continuación una breve descripción de la programación semidefinida y el uso de algunas herramientas computacionales apropiadas para resolver este tipo de programas matemáticos convexos.

11.2. Elementos de teoría y práctica

La programación semidefinida, basada en desigualdades matriciales (LMI - Linear Matrix Inequalities), ha tomado fuerza en los últimos tiempos en áreas como ingeniería de control, diseño de estructuras y la optimización no lineal. Los dos factores que se destacan en este tipo de problemas son:

- Los programas semidefinidos pueden expresar una gran variedad de especificaciones de diseño.
- Una vez formulado el problema en términos de desigualdades matriciales es posible resolverlo con algoritmos de optimización convexa.

Daremos una introducción acerca de los programas semidefinidos y mostraremos una herramienta diseñada por Gahinet *et al* [14] que utiliza métodos de punto interior. Esta herramienta computacional está enfocada para resolver programas semidefinidos y problemas de control.

Una desigualdad matricial (LMI) tiene la forma,

$$F(x) = F_0 + \sum_{i=1}^m x_i F_i > 0 \quad (11.15)$$

donde $x \in \mathbb{R}^m$ y las matrices $F_0, \dots, F_m$ son matrices simétricas. Donde $>$ significa definida positiva.

Es fácil ver que una desigualdad matricial define un conjunto convexo. Si $F(x) > 0$ y $F(y) > 0$, para todo $\lambda \in [0, 1]$ se tiene que,

$$\begin{aligned} D(\lambda x + (1 - \lambda)y) &= F_0 + \sum_{i=1}^m (\lambda x_i + (1 - \lambda)y_i)F_i \\ &= \lambda F_0 + \sum_{i=1}^m \lambda x_i F_i + (1 - \lambda)F_0 + \sum_{i=1}^m (1 - \lambda)y_i F_i \\ &= \lambda F(x) + (1 - \lambda)F(y) > 0 \end{aligned} \quad (11.16)$$

Luego el conjunto $\{x \in \mathbb{R}^m | F(x) > 0\}$ es convexo.

Si $M_1, \dots, M_m$ son matrices cuadradas usamos la notación:

$$\text{diag}(M_1, \dots, M_m) = \begin{bmatrix} M_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & M_m \end{bmatrix}. \quad (11.17)$$

que permite que varias desigualdades matriciales se puedan expresar como una sola. Se puede encontrar que una desigualdad matricial permita representar poliedros, en otras palabras, si se quiere expresar el conjunto de desigualdades lineales empleando la forma (11.15), se debe tomar $F_0 = \text{diag}(b_1, \dots, b_m)$ y $F_i = \text{diag}(-a_{i1}, \dots, -a_{im})$, donde a_{ij} son entradas de la matriz de coeficientes A y b_i las componentes del vector b .

11.3. Métodos computacionales

Como ya hemos visto, una desigualdad matricial lineal es cualquier restricción de la forma:

$$A(x) = A_0 + x_1 A_1 + \dots + x_N A_N < 0 \quad (11.18)$$

donde:

- $x = (x_1, \dots, x_N)$ es el vector de las variables de decisión o variables de diseño.
- $A_0, \dots, A_N$ son matrices simétricas dadas por los parámetros del problema.

Encontrar un punto x solución para (11.18) es un problema de factibilidad que puede ser resuelto numéricamente y podemos garantizar que se encontrará una solución.

Existen tres tipos de problemas genéricos que involucran desigualdades matriciales:

1. Encontrar una solución factible al problema característico compuesto por un sistema de desigualdades matriciales:

$$A(x) < 0 \quad (11.19)$$

2. Minimizar una función objetivo lineal bajo las restricciones dadas por una desigualdad matricial:

$$\text{Minimizar } c^T X \quad \text{s. a. } A(x) < 0 \quad (11.20)$$

Esta es la familia de programas semidefinidos que nos interesan.

3. Resolver el problema de valores propios generalizado

$$\text{Minimizar } \lambda \quad \text{s. a. } \begin{cases} A(x) < \lambda B(x) \\ B(x) > 0 \\ C(x) > 0 \end{cases} \quad (11.21)$$

Este problema es cuasiconvexo y puede ser resuelto por técnicas similares.

11.3.1. Algunos problemas interesantes en desigualdades matriciales

Nos parece importante comentar que todo programa lineal se puede expresar como un programa semidefinido. Veremos varios ejemplos.

Ejemplo 1

Una restricción cuadrática convexa

$$(Ax + b)^T(Ax + b) - x^T x - d \leq 0$$

con $x \in \mathbb{R}^k$, se puede escribir como la siguiente desigualdad matricial,

$$\begin{bmatrix} I & Ax + b \\ (Ax + b)^T & c^T x + d \end{bmatrix} \geq 0 \quad (11.22)$$

Lo cual se puede escribir en la forma general (11.15) tomando

$$F_0 = \begin{bmatrix} 1 & b \\ b^T & d \end{bmatrix} \quad F_i = \begin{bmatrix} 0 & a_i \\ a_i^T & c_i \end{bmatrix}. \quad (11.23)$$

Donde $i = 1, \dots, k$, y $A = (a_1, \dots, a_k)$. Por lo tanto podemos ver que todo programa cuadrático convexo se puede expresar como un programa semidefinido.

Ejemplo 2

Las restricciones:

$$\text{Tr}(S(x)^T P(x)^{-1} S(x)) < 1, P(x) > 0 \quad (11.24)$$

donde $P(x)$ es una matriz simétrica de $n \times n$, Tr simboliza la traza de la matriz y $S(x)$ tiene dimensiones $n \times p$, se pueden expresar, más fácilmente, por medio de las siguientes desigualdades matriciales, donde X es una variable que representa una matriz simétrica de $p \times p$ [44]:

$$\text{Tr}(x) < 1, \quad \begin{bmatrix} X & S(x)^T \\ S(x) & P(x) \end{bmatrix} > 0 \quad (11.25)$$

Ejemplo 3

Es muy importante, para el tipo de problemas que nosotros abordamos, observar que la definición positiva de las matrices de restricción se puede expresar en forma de una desigualdad matricial. Por ejemplo si consideramos la definición positiva de la matriz de Hankel:

$$\begin{bmatrix} m_0 & m_1 & m_2 \\ m_1 & m_2 & m_3 \\ m_2 & m_3 & m_4 \end{bmatrix} \geq 0 \quad (11.26)$$

Podemos expresarla en la forma general (11.15), basta con factorizar las variables de diseño m_k de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} m_0 \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + m_1 \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + m_2 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \\ + m_3 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} + m_4 \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \geq 0 \end{aligned} \quad (11.27)$$

A continuación explicaremos el uso de las rutinas comerciales LMI-CONTROL [14] que permiten resolver programas semidefinidos en un gran número de variables como hemos hecho en el desarrollo de esta investigación.

11.4. Aspectos computacionales

El paquete LMI-CONTROL desarrollado por Gahinet, *et. al.* [14] comercializado por MathWorks es una librería para la especificación de desigualdades matriciales y la resolución de los problemas estándar mencionados en la sección anterior. Ella está orientada al manejo de estructuras de datos y permite describir fácilmente múltiples restricciones como desigualdades matriciales. En este paquete las variables de diseño se especifican como variables contenidas en matrices con alguna estructura dada.

Una vez el problema en desigualdades matriciales esté diseñado, se resuelve numéricamente llamando al solucionador apropiado. Los tres solucionadores *feasp*, *mincx* y *gevp* constituyen el motor computacional de la toolbox y su alto desempeño se debe a una programación previamente realizada utilizando el lenguaje C por Gahinet *et. al.* [14].

La ayuda posee las siguientes características:

- Permite especificar sistemas de desigualdades matriciales simbólicamente con un editor especializado o secuencialmente con los comandos *lmivar* y *lmiterm*.
- Recuperar información de sistemas de desigualdades matriciales ya incorporada.

- Permite modificar sistemas de desigualdades matriciales.
- Permite resolver los tres problemas genéricos que ya describimos.

11.4.1. Terminología

Cualquier desigualdad matricial lineal puede ser expresada en la forma canónica (11.18), sin embargo no es esta la forma que emplea la herramienta computacional. Por ejemplo, considere la desigualdad de Liapunov,

$$A^T X + X A < 0 \quad (11.28)$$

donde

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -2 \end{bmatrix} \quad (11.29)$$

y la variable,

$$X = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 \\ x_3 & x_4 \end{bmatrix} \quad (11.30)$$

es una matriz simétrica. Para este caso las variables de decisión son las entradas x_1, x_2, x_3 de X y la forma canónica como LMI (Desigualdades Matriciales) es:

$$x_1 \begin{bmatrix} -2 & 2 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ -3 & 4 \end{bmatrix} + x_3 \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -4 \end{bmatrix} < 0 \quad (11.31)$$

Claramente esta expresión es más intuitiva y transparente que (11.28), pero esta forma es muy ineficiente para propósitos de almacenamiento en la memoria del computador, ya que requiere almacenar $n^2/2$ matrices, donde n es el tamaño de la matriz A , mientras que en la forma (11.28) se requiere el almacenamiento en memoria de tan solo $n - 1$ matrices. Además, trabajar en la forma canónica reduce el desempeño de los solucionadores LMI, por estas razones, la herramienta usa una representación estructurada de desigualdades matriciales.

Por otra parte, la forma general (11.28) describe las variables de decisión como variables contenidas en una matriz X y por lo tanto sólo se requiere almacenar la matriz A .

En general, los problemas que involucran desigualdades matriciales presuponen una matriz dada en bloques, donde cada bloque es una combinación afin de las variables en matrices. Para aclarar algunos términos técnicos, considere la siguiente expresión:

$$N^T \begin{bmatrix} A^T X + X A & X C^T & B \\ C X^T & -I & D \\ B^T & D^T & -I \end{bmatrix} N < 0 \quad (11.32)$$

donde A, B, C, D, N son matrices dadas y las variables del problema son $X = X^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

- N se llamará factor externo y la matriz en bloque

$$L(X) = \begin{bmatrix} A^T X + X A & X C^T & B \\ C X^T & -I & D \\ B^T & D^T & -I \end{bmatrix} \quad (11.33)$$

se llamará factor interno. El factor externo no necesita ser cuadrático y muchas veces está ausente.

- X es la variable en forma de matriz para el problema.
- El factor interno $L(X)$ es una matriz definida por bloques y simétrica.
- Cada bloque de $L(X)$ es una expresión afin de la variable X , que se puede escribir como la suma de otros términos. Por ejemplo, el bloque en la posición (1,1) contiene dos elementos: $A^T X$ y $X A$.

De acuerdo a estas definiciones la herramienta requiere dos pasos para especificar el problema LMI:

1. Declaración de las dimensiones y la estructura de cada variable como matriz $X_1, \dots, X_K$.
2. Describir el contenido de cada término, como acabamos de explicar.

Este proceso crea la representación interna del sistema LMI y una descripción computacional, la cual es usada por los solucionadores y en todas las manipulaciones subsecuentes del sistema LMI.

Hay dos maneras de generar la descripción interna de un sistema LMI dado:

1. Por una secuencia de comandos `lmivar/lmiterm`.
2. Con el editor gráfico LMI `lmiedit` donde los términos se pueden especificar como una expresión simbólica en matrices.

A continuación describiremos los dos procesos.

11.4.2. Secuencia de comandos

La librería se compone por varios comandos básicos: `setlmis`, `getlmis`, `lmivar` y `lmiterm`. Estos comandos son suficientes para la descripción de cualquier restricción LMI.

setlmis y getlmis

Toda descripción de un sistema LMI debe empezar con `setlmis` y terminar con `getlmis`. La función `setlmis` inicializa la descripción del sistema LMI de la siguiente manera:

```
setlmis{[]}
```

Si se desea adherir algún contenido a un sistema LMI con otra representación interna LMISO, se especifica como:

```
setlmis(LMISO)
```

Cuando el sistema LMI esté completamente definido, se envía el comando

```
LMISYS = getlmis
```

y éste regresa la representación interna del sistema LMI en la variable *LMISYS*, además debe ser usado únicamente después de declarar todas las matrices y términos que se involucran en el problema.

lmivar

Las matrices que involucra el problema se declaran de manera secuencial con el comando *lmivar* y se caracterizan por una estructura bien definida. Para facilitar la especificación de esta estructura, la herramienta ofrece formas predefinidas.

La declaración de esta función es:

```
X = lmivar(Tipo, estructura)
```

donde *tipo* es el tipo de estructura a crear. Se cuenta con tres opciones.

1. Estructura en bloques simétrica (Tipo = 1): Corresponde a la definición de matrices diagonales.

$$X = \begin{bmatrix} D_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_2 & \dots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & D_r \end{bmatrix}, \quad (11.34)$$

donde cada bloque de la diagonal D_j es una matriz cuadrada, cero, una matriz simétrica o un escalar. Esto se define mediante la asignación de estructura dentro de la función como un vector compuesto por dos componentes:

```
estructura = [Tamaño r-ésimo bloque, tipo de bloque]
```

La segunda componente se define como 1 si todo el bloque es una variable, 0 si es un escalar y -1 si es un bloque de ceros.

2. Estructura rectangular (Tipo = 2): Corresponde a matrices rectangulares arbitrarias con estructuras particulares. El tamaño se define en estructura de la siguiente forma:

```
estructura = [Número de filas, Número de columnas]
```

3. Estructuras Generales (Tipo = 3): Se utiliza para describir estructuras más sofisticadas. En este tipo de matrices cada entrada de X se asume independiente y puede ser 0, x_n o $-x_n$ donde a x_n se le denomina la n -ésima variable de decisión en el problema. Esto se define en estructura, la cual para este caso, es una matriz de las mismas dimensiones de X tal que:

- $\text{struct}(i,j)=0$ si $X(i,j)$ no es una variable.
- $\text{struct}(i,j)=n$ si $X(i,j) = x_n$,
- $\text{struct}(i,j)=-n$ si $X(i,j) = -x_n$

lmiterm

Después de declarar las variables en forma de matriz con el comando `lmivar`, queda declarar el contenido de cada restricción LMI

La declaración de esta función es:

`lmiterm(Identificador,A,B, bandera)`

El primer parámetro de entrada es un vector compuesto por 4 componentes en los cuales se define en qué lado de la desigualdad se encuentra, en qué bloque de la matriz se encuentra y si pertenece a una constante o está multiplicado por alguna variable.

`Identificador = [ID(1) ID(2) ID(3) ID(4)]`

- El primer término del vector `Identificador` contiene:

$$\text{ID}(1) = \begin{cases} +p, & \text{Términos a la izquierda del p-ésimo LMI} \\ -p, & \text{Términos a la derecha del p-ésimo LMI} \end{cases} \quad (11.35)$$

- El segundo y tercer término del vector `Identificador` posee:

$$\text{ID}(2), \text{ID}(3) = \begin{cases} [0,0], & \text{Factores externos} \\ [i,j], & \text{Términos en el bloque } (i,j) \text{ a la derecha} \\ & \text{o izquierda del factor interno} \end{cases} \quad (11.36)$$

- Y el último término:

$$\text{ID}(4) = \begin{cases} 0, & \text{Términos constantes} \\ X, & \text{Términos } AXB \\ -X & \text{Términos } AX^T B \end{cases} \quad (11.37)$$

Los argumentos `A` y `B` contienen datos numéricos y se asignan de acuerdo con el tipo de término.

Al último parámetro de la función `bandera` sólo se le asigna el valor 's' cuando se trabajan expresiones conjugadas de la forma $AXB + B^T X^T A^T$.

Término	A	B
Factor externo C	Valor de matriz C	_____
Término constante C	Valor de matriz C	_____
Término variable AXB o $AX^T B$	Valor de matriz A	Valor de matriz B

Cuadro 11.1: Asignación de A y B

A continuación mostraremos una secuencia de comandos para realizar la declaración de la ecuación LMI:

$$\begin{bmatrix} A^T X + X A + C^T S C & X B \\ B^T X & -S \end{bmatrix} < 0$$

$$X > 0 \quad (11.38)$$

$$S > I,$$

donde $A \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$, $X \in \mathbb{R}^{6 \times 6}$, $S \in \mathbb{R}^{4 \times 4}$, $B \in \mathbb{R}^{6 \times 4}$, $C \in \mathbb{R}^{4 \times 6}$ y las variables de diseño son las contenidas en las matrices X y S .

A continuación se muestra la secuencia de comandos para declarar este sistema LMI con una explicación de cada comando.

```
%Iniciación de herramienta LMI
setlmis([]);
%Estructura tipo 1. Variable de tamaño 6x6
%y definida como un bloque simétrico
X = lmivar(1,[6 1]);
%Estructura tipo 1. S posee dos bloques diagonales, el primero
%es un bloque escalar de tamaño 2x2 y el segundo es un bloque
%completo de tamaño 2 x 2
S = lmivar(1,[2 0;2 1]);

%PRIMERA ECUACIÓN LMI
%(A^T)(X)+(X)(A) situado en la parte izquierda de la ecuación LMI
%en el término (1,1) 's' produce la forma (A^T)(X)+(X)(A)
lmiterm([1 1 1 X],1,A,'s');
%término (C^T)SC situado en la parte izquierda de la ecuación LMI
%en el término (1,1)
lmiterm([1 1 1 S],C',C)
%(X)(B) situado en la parte izquierda de la ecuación LMI
%en el término (1,2)
lmiterm([1 1 2 X],1,B)
%(-S) situado en la parte izquierda de la ecuación LMI
%en el término (2,2)
lmiterm([1 2 2 S],-1,1)

%Segundo término LMI
%término X situado en la parte derecha de la ecuación LMI
```

```

lmiterm([-2 1 1 X],1,1);

%Tercer LMI
% término S situado en la parte derecha de la ecuación LMI
lmiterm([-3 1 1 S],1,1);
% Matriz identidad situado en la parte izquierda de la ecuación LMI
lmiterm([3 1 1 0],1); LMISYS = getlmis

```

11.4.3. Editor gráfico LMI

El editor gráfico `lmiedit` es una interfaz de usuario gráfica para especificar los sistemas LMI en una manera simbólica. Se invoca escribiendo el comando

```
lmiedit
```

en la ventana de trabajo de Matlab®. Para declarar el problema LMI en este ambiente se requiere:

1. Declarar cada variable contenida en matrices en la mitad superior del ambiente. La estructura se caracteriza por su tipo (S para bloques simétricos, G para otras estructuras). Es el paralelo del comando `lmivar`.
2. Especificar los LMIs como expresiones clásicas de Matlab® en la parte inferior.

La declaración para el sistema de ecuaciones LMIs (11.38) en el editor gráfico se muestra en la figura 11.1

11.5. Rutinas de programas semidefinidos

Nuestro objetivo es resolver los programas semidefinidos (11.20), que son la base para el cálculo de envolturas convexas, cálculo de envolturas policonvexas y encontrar microestructuras en modelos para elasticidad. La forma general de estos programas se puede reescribir de la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 &\text{Minimizar } c^T X \text{ sobre } x \in \mathbb{R}^N \\
 &\text{sujeto a } A(x) < B(x).
 \end{aligned}
 \tag{11.39}$$

Para resolver este programa matemático, se utiliza el solucionador `mincx` de la herramienta LMI. A continuación lo describiremos con detalle.

`mincx`

Este solucionador se encarga de minimizar objetivos lineales de la forma $c^T x$ donde x es el vector de variables de decisión. Se ejecuta como una función cuya sintaxis es:

```
[copt,xopt] = mincx(lmisys,c,opciones,xinicial,objetivo)
```

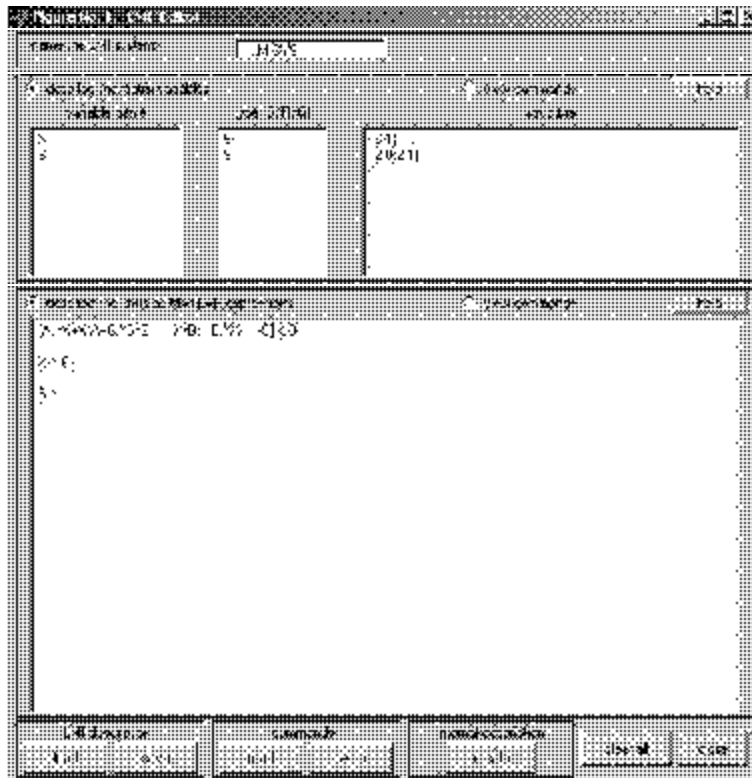


Figura 11.1: Interfaz gráfica LMI lmiedit.

Las restricciones LMI se imponen de la forma descrita anteriormente, utilizando una secuencia de funciones o el editor gráfico, estas se deben encontrar almacenadas en `lmisys`, para que sea el primer argumento de entrada de la función.

El segundo argumento de entrada en la función es el vector de coeficientes c el cual corresponde a los coeficientes de la función objetivo y debe poseer las mismas dimensiones de x , las opciones dan acceso a ciertos parámetros de control, el vector $x_{inicial}$ es un punto inicial para el minimizador y debe poseer las mismas dimensiones de c y por último el valor objetivo limita el proceso de minimización en $c^T x \leq \text{objetivo}$.

Como argumentos de salida, la función devuelve el mínimo global copt que se obtiene con la evaluación de la función en los valores x_{opt} .

Para ilustrar el uso del minimizador, se considera el siguiente problema de optimización:

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } \text{Tr}(X) \\ &\text{s. a. } \begin{bmatrix} A^T X + X A + Q & X B \\ B^T X & -I \end{bmatrix} < 0 \end{aligned} \quad (11.40)$$

con los datos

$$A = \begin{bmatrix} -1 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 1 \\ 1 & -2 & -1 \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad Q = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & -3 & -12 \\ 0 & -12 & -36 \end{bmatrix} \quad (11.41)$$

La rutina para solucionar este programa matemático es la que mostramos a continuación.

1. Definir las restricciones como ecuaciones LMIs.

```
A = [-1 2 1;3 2 1;1 -2 -1];
B = [1;0;1];
Q=[1 -1 0;-1 3 -12;0 -12 -36];
%Inicializar la herramienta LMI
setlmis([])
%Definir Variable X como bloques de 3 x 3,
%simetria completa
X = lmivar(1,[3 1]);
%Definicion del término (1,1) de la restriccion LMI
%(A^T)(X)+(X)(A)
lmiterm([1 1 1 X],1,A,'s');
%Agregar otro término Q a la posicion (1,1) de la restriccion
lmiterm([1 1 1 0],Q)
%Definicion del término (2,2) como -I
lmiterm([1 2 2 0],-1)
%Defonicion del término (1,2) y (2,1)
lmiterm([1 2 1 X],B.',1)
%Fin de declaracion de LMIs
LMIs = getlmis
```

2. Definir los coeficientes de la función objetivo

```
%Extracion de coeficientes para la minimizacion
c = mat2dec(LMIs,eye(3));
```

3. Correr el minimizador.

```
%Rutina de optimizacion
[copt,xopt] = mincx(LMIs,c);
```

Al correr esta rutina obtenemos un valor óptimo de la función objetivo -52.430234 .

11.5.1. Problema de las envolturas convexas

Procedemos a describir la solución de las envolturas convexas unidimensionales en un punto dado en la forma de su programa semidefinido correspondiente. Este problema, luego de aplicar el método de momentos y relajación semidefinida a un polinomio $f(x) = 7x - 5x^2 - 3x^3 + x^4$ se convierte en,

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } 7m_1 - 5m_2 - 3m_3 + m_4 \\ &\text{s. a. } \begin{bmatrix} m_0 & m_1 & m_2 \\ m_1 & m_2 & m_3 \\ m_2 & m_3 & m_4 \end{bmatrix} \geq 0 \end{aligned} \quad (11.42)$$

Debido a que $m_0 = 1$ por ser una distribución de probabilidad y $m_1 = a$ donde a es el punto en el que se desea hallar la envoltura convexa, llevamos este problema a una forma estándar,

$$\begin{aligned} &\text{Minimizar } 7m_1 - 5m_2 - 3m_3 + m_4 \\ &\text{s. a. } \begin{bmatrix} 1 & a & 0 \\ a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & 0 & m_2 \\ 0 & m_2 & m_3 \\ m_2 & m_3 & m_4 \end{bmatrix} \geq 0 \end{aligned} \quad (11.43)$$

Este programa se codifica de la siguiente manera,

```
%Inicializar LMI
setlmis([]);
%Matriz de estructuras
S = [0 0 1; 0 1 2; 1 2 3]
%Definición de la variable como tipo 3
%ya que no se presenta simetría
X=lmivar(3,3);
%Se pone la variable de momentos en el
%lado derecho de la forma estándar LMI
lmiterm([-1 1 1 X],1,1);
%Definición de la matriz constante en el
%lado derecho de la forma estándar LMI
A=[1 a 0;a 0 0;0 0 0];
lmiterm([-1 1 1 0],A);
%Finaliza LMI
LMIs = getlmis;
%Define coeficientes de los momentos
c = [-5 -3 1];
%Corre solucionador
[yopt,xopt] = mincx(LMIs,c)
```

en el rango $[-4, 5]$. Al ejecutar esta rutina en un rango de puntos de -4 a 5 con pasos de $0,01$ se obtiene la envoltura convexa de la función. El resultado se muestra en la figura 11.2.

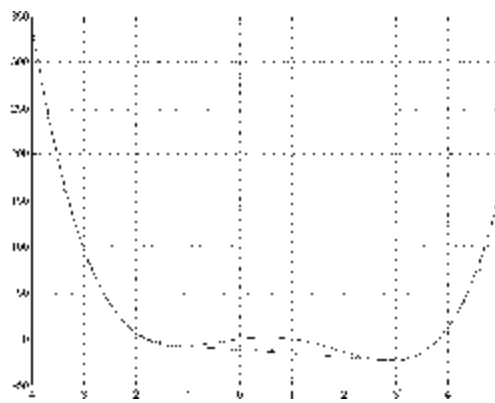


Figura 11.2: Función y su envoltura convexa.

Capítulo 12

Conclusiones

En el presente proyecto de investigación hemos avanzado en las siguientes direcciones. En primer lugar hemos acercado los fundamentos físicos de la ciencia de materiales, la cristalografía y la metalurgia a modelos matemáticos más completos en términos de problemas variacionales generalizados que dan una respuesta apropiada a fenómenos como distribuciones de fases sólidas en redes cristalinas y transformaciones martensíticas en aleaciones comerciales los cuales tienen un gran interés en diseño de ingeniería y aplicaciones industriales.

En segundo lugar hemos hecho un uso extensivo del análisis convexo para dar respuesta a problemas altamente no lineales, como son el análisis de envolturas convexas en varias dimensiones y el cálculo de envolturas policonvexas para potenciales de energía de deformación que operan sobre matrices de deformaciones. Cabe resaltar la naturaleza geométrica de estos problemas, pero también sus fuertes implicaciones en la comprensión de problemas variacionales no convexos propios de la teoría de la elasticidad.

En tercer lugar, logramos el modelaje del comportamiento mecánico de una barra compuesta de aceros dúctiles, a través de una representación de su potencial de energía de deformación por medio de una interpolación polinomial que reproduce sus características cualitativas. Con este modelo pudimos abordar el cálculo de la microestructura subyacente, a través del estudio del balance energético del cuerpo, que toma la forma de un problema variacional no convexo, el cual puede llevarse a la forma de una relajación semidefinida y finalmente ser resuelto mediante técnicas de optimización numérica adecuadas. Resaltando el uso de herramientas algebraicas apropiadas para obtener la forma explícita de la microestructura a partir de la solución numérica para esta.

En cuarto lugar, conseguimos poner a punto el método de los momentos, que conduce a una relajación semidefinida, para darle respuesta explícita a problemas variacionales no convexos en dos dimensiones, que provienen de modelos de balances energéticos en la teoría de la elasticidad no lineal. En este contexto presentamos las medidas de Young compuestas por medidas parametrizadas, las cuales actúan como objetos de diseño en complejos problemas variacionales generalizados, que a su vez nos conducen a una relajación semidefinida, siempre

que hagamos una correcta caracterización de sus variables de diseño como los momentos algebraicos de una distribución de probabilidad bivariada.

En este mismo contexto, destacamos el diseño del modelo discreto como programa matemático que representa a la relajación semidefinida. La cual es un complejo problema de control óptimo que proviene del análisis de un modelo variacional en dos dimensiones para un balance energético en elasticidad. Es importante señalar que este modelo implica, además de la adecuada caracterización de momentos bivariados, una cuidadosa selección de restricciones lineales que representarán la condición gradiente en las variables del modelo. Resaltamos que ésta es una condición de carácter continuo, cuya representación discreta lleva a un gran entramado de integrales curvilíneas sobre el modelo discreto.

En quinto lugar, resaltamos como un logro en esta investigación, la metodología propuesta para analizar envolturas convexas de polinomios en varias variables y el cálculo de envolturas policonvexas para funciones definidas en matrices, con forma no policonvexa. Este objetivo se consiguió haciendo un adecuado uso de técnicas de programación semidefinida, para resolver programas matemáticos convexas definidos en desigualdades matriciales. Donde hacemos notar que esta es la estructura subyacente de los problemas de optimización que obtenemos, después de hacer un cuidadoso análisis del problema empleando análisis convexo, teoría de la probabilidad y resultados recientes acerca de la teoría de los momentos multivariados.

En sexto lugar, debemos mencionar que un logro importante de este proyecto de investigación fue que supuso la actualización y puesta a punto de diferentes entornos computacionales avanzados para resolver problemas de optimización no lineal en grandes dimensiones. Es así como el desarrollo de los problemas tratados en este documento supuso la instalación de equipos de cómputo de alto rendimiento, la instalación de software profesional para elaborar programas matemáticos no lineales definidos en un gran número de variables y el desarrollo de los modelos propuestos empleando estas herramientas. Específicamente, utilizamos lenguajes algebraicos para modelar problemas de optimización: AMPL y GAMS. Pero además utilizamos rutinas especializadas para programación semidefinida de reciente creación.

Finalmente, destacamos que con este proyecto se ha consolidado una línea definida de investigación que propone el uso de métodos analíticos y computacionales propios de la optimización no lineal, para dar una respuesta explícita a modelos energéticos que se presentan como problemas variacionales no convexas en elasticidad no lineal y ciencia de los materiales.

Esta consolidación ha tenido lugar en todos los frentes. Primero, en el equipo humano que conforma el grupo de investigación Optimización y Análisis Numérico de la Universidad de los Andes, el cual posee la madurez y la experiencia necesarias para desarrollar modelos físicos para balances energéticos en redes cristalinas, así como para analizar estos modelos a la luz de la teoría de medidas parametrizadas y darles respuestas explícitas mediante la solución numérica de las relajaciones semidefinidas que se obtienen. Esto implica que el equipo goza de la experiencia para abordar problemas de optimización no lineales en altas dimensiones.

En segundo lugar, la investigación propuesta se ha fortalecido en recursos físicos y computacionales, es así como se cuenta con una bibliografía actualizada, las licencias del software profesional relevantes para el tipo de problemas no lineales que surgen de los modelos propuestos, además de equipos de cómputo de alto rendimiento para simulaciones numéricas altamente exigentes.

En tercer lugar, la investigación se ha enriquecido en nuevas preguntas y nuevos retos, es así como debemos abordar problemas semidefinidos provenientes de la cuasi-convexidad, concepto de gran utilidad en mecánica de medios continuos aún por desarrollar.

En cuarto lugar, la línea de investigación que proponemos ya ha sido sustentada en foros de discusión especializados a nivel internacional, como por ejemplo la *4th international conference in frontiers in global optimization*, llevada a cabo en Grecia en el año 2003. Además nos ha permitido entablar un nutrido intercambio académico y científico con instituciones y personas en el exterior como son el Centro de Internacional de Métodos Numéricos en la Ingeniería -CIMNE- de Barcelona y el grupo de Investigación en Optimización y Métodos Variacionales -OMEVA- de la Universidad de Castilla la Mancha.

Bibliografía

- [1] Dacorogna, B., *Direct methods in The Calculus of Variations*, Springer verlag, 1989. Dacorogna
- [2] Buttazzo, G., M. Giaquinta & S. Hildebrand., *One-Dimensional Variational Problems*, Oxford, 1998.
- [3] Pedregal, P., *Variational Methods in Nonlinear Elasticity*, SIAM, 2000.
- [4] Pedregal, P., *Parametrized Measures and Variational Principles*, Birkhauser, 1997.
- [5] Müller, S., *Variational models for microstructures and phase transitions.*, Lecture notes #2, Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften, Leipzig, 1998.
- [6] Carstensen, C. & T. Roubicek, *Numerische Mathematik* Vol **86**, 395, 2000.
- [7] Roubicek, T., *Relaxation in Optimization Theory and Variational Calculus*, De Gruyter, 1997.
- [8] Akhiezer, N. & Krein, M., *Some questions in the theory of moments*, Translations of Mathematical Monographs, vol **2**, AMS, 1962.
- [9] Lasserre, J., *Global optimization with polynomials and the problem of moments*, *SIAM J. Optim.*, vol **11**, 796-817, 2001.
- [10] Shohat, J.A. & Tamarkin J.D., *The Problem of Moments*, *Mathematical Surveys.*, No. 1, AMS, 1943.
- [11] Casari, L., *Optimization Theory and Application*, Springer Verlag, 1983.
- [12] Fourer, R., Gay, D.M. & Kernighan, B. W., *AMPL A Modeling Language for Mathematical Programming*, *Second Edition*, Thomson, 2003.
- [13] Castillo, E., et. al, *Formulación y Resolución de Modelos de Programación Matemática en Ingeniería y Ciencia*, Universidad de Castilla-La Mancha, 2002.
- [14] Gahinet, P., et. al, *LMI Control Toolbox For Use with MATLAB®*, The MathWorks Inc., 1995.

- [15] Rockafellar, T., *Convex Analysis*, Princeton, 1970.
- [16] Meziat, R., *Analysis of non convex polynomial programs by the method of moments*, Frontiers in Global Optimization, C. Floudas and P. Pardalos, eds, Nonconvex Optimization and its Applications Series, vol. 74, p. 353-372, Kluwer, 2003.
- [17] Meziat, R., *The Method of Moments in Global Optimization*, *Journal of Mathematical Sciences.*, vol. 116, 3303-3324, Kluwer, 2003.
- [18] Curto, R. & Fialkow, L.A., *Recursiveness, positivity and truncated moment problems*, *Houston Journal of Mathematics.*, Vol 17, 1991.
- [19] Curto, R. & Fialkow, L.A., *Solution of the truncated complex moment problem for flat data*, *Memoirs of the AMS*, No. 568, 1996.
- [20] Curto, R. & Fialkow, L.A., *The truncated complex k -moment problem*, *Transactions of the AMS*, vol 352, No. 6, p. 2825-2855, 2000.
- [21] Lasserre, J., *Semidefinite programming vs lp relaxations for polynomial programming*, *Mathematics of Operations Research Journal*, vol. 27, 347-360, 2002.
- [22] Misner, C. W., Thorne, K. S. & Wheeler, J. A., *Gravitation*, W. H. Freeman and Company, 1973.
- [23] Griffiths, D. J., *Introduction to quantum mechanics*, Prentice Hall, 1995.
- [24] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. & Lalve, F., *Quantum mechanics*, John Wiley & Sons, 1977.
- [25] Ruoff, A. L., *Materials science*, Prentice-Hall, 1973.
- [26] Valencia, A., *Transformaciones de Fase en Metalurgia*, Editorial Universidad de Antioquia, 1998.
- [27] Shackelford, J. F., *Introduction to Materials Science for Engineers*, 4ta edición, Prentice Hall, 1996.
- [28] Hibbeler, R. C., *Mechanical Properties of Materials*, third edition, Prentice Hall, 1997.
- [29] Ashby, M. F. & Jones, D. R. H., *Engineering materials*, Pergamon Press, 1980.
- [30] Goldstein, H., *Classical Mechanics*, second edition, Addison Wesley, 1980.
- [31] Callen, H. B., *Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics*, second edition, John Wiley & sons, 1985.
- [32] Jackson, J. D., *Classical Electrodynamics*, second edition, John Wiley & sons, 1962.

- [33] Jost, J. & Li-Jost, X., *Calculus of Variation*, Cambridge University Press, 1998.
- [34] Pedregal, P., *Introduction to Optimization*, Springer, 2000.
- [35] Gantmacher, F., *The Theory of Matrices*, Vol 1, Chelsea, 1990.
- [36] Truskinovsky, L., & Zanzotto, G., *Mechanica*, Vol 30, 577-589, 1995. Dacorogna.
- [37] Truskinovsky, L., & Zanzotto, G., *J. Mech. Phys. Solids*, Vol 44, 1371-1408, 1996.
- [38] James, R. D., *Archive for Rational Mechanics and Analysis* by Springer-Verlag, 99-140, 1979.
- [39] Meziat, R. J., *El Método de los Momentos para Problemas Variacionales No Convexos*, tesis de doctorado, Universidad Politécnica de Cataluña, Barcelona, 2001.
- [40] Bhadeshia, H. K. D. H., *Worked examples in the Geometry of Crystals*, Carlton House Terrace, 2001.
- [41] Boyd, S., et. al., *Linear matrix inequalities in system and control theory*, SIAM, studies in applied mathematics series, Vol 15, 1994.
- [42] Vandenberghe, L. and Boyd, S., *Semidefinite programming*, SIAM review, Vol 38, 1996.
- [43] Ben-Tal, A., Nemirovskii, A.S., *Lectures on Modern Convex Optimization*, TMPS, SIAM, 2001.
- [44] Junca, M., *Introducción a las Desigualdades Lineales Matriciales y su Aplicación en Control*, tesis de grado para Matemático, Universidad de los Andes, Bogotá, 2003.
- [45] Brooke, A., et. al., *GAMS A USER'S GUIDE*, GAMS Development Corporation, 1998.
- [46] Otto, F. & Kohn, R., *Small surface energy, coarse-graining, and selection of microstructure*, Proceedings of the 16th Annual CNLS Conference
- [47] Muñoz, J. & Pedregal, P., *Explicit solutions of non convex variational problems in dimension one*, *J. Applied Mathematics and Optimization*, Vol 41, 129-140.
- [48] Moré, J.J. and Wright, S. J., *Optimization, Software Guide*, SIAM, 1993.
- [49] Meziat, R. J., *From a nonlinear, nonconvex variational problem to a linear, convex formulation*, aceptado en *J. Applied Mathematics and Optimization*.

- [50] Meziat, R. J., *The method of moments for non convex variational problems*, Advances in Global Optimization and Convex Analysis, Kluwer, 2001.
- [51] Nesterov, Y., *Squared functional systems and optimization problems in High Performance Optimization*, Frenk, H., K. Roos and T. Terlaky, eds., Kluwer, 2000.
- [52] Krein, M. G. & Nudelman, A. A., *The Markov moment problem and extremal problems*, Translations of Mathematical Monographs, vol. 50, AMS, 1977.
- [53] Shor, N. Z., *Nondifferentiable Optimization and Polynomial Problems*, Kluwer, 1998.
- [54] Young, L. C., *Lectures on Calculus of Variations and Optimal Control Theory*, Saunders, 1969.
- [55] Karlin, S. & Studden, W. J., *Tchebycheff Systems with Applications in Analysis and Statistics*, Interscience Publishers, John Wiley and Sons, New York, 1966.
- [56] Muench, D. & Titli, D., *Introduction to the Design of Fuzzy Controllers Using Linear Matrix Inequalities*, Final Internship Report, 1999.
- [57] Boyd, S., & El Ghaoui, L., *Method of Centers for Minimizing Generalized Eigenvalues*, Linear Algebra and Applications, Special issue on Numerical Linear Algebra Methods in Control, Signals and Systems, Vol 188, 63-111, 1993.
- [58] Grötschel, M., et. al., *Geometric Algorithms and Combinatorial Optimization*, Springer Verlag, 2nd ed. 1993.
- [59] Nesterov, & Nemirovsky, A., *Interior-Point Polynomial Methods in Convex Programming*, Studies in Applied Mathematics, Society for Industrial and Applied Mathematics, vol. 13, 1994.
- [60] Renegar, J., *A Mathematical View of Interior-Point Methods in Convex Optimization*, Society for Industrial and Applied Mathematics: Mathematical Programming Society, 2001.
- [61] Tuy, H., *Convex Analysis and Global Optimization*, Kluwer Academic Publishers, 1998.
- [62] Ogata, K., *Modern Control Engineering*, third edition, Prentice Hall, 1997.
- [63] Rao, C. R., *Matrix algebra and its applications to statistics and econometrics*, World Scientific, 1998.
- [64] Fiacco, A. & McCormick, G., *Nonlinear programming : sequential unconstrained minimization techniques*, John Wiley and Sons, 1968.

- [65] Bazaraa, M., *et. al.*, *Nonlinear programming : theory and algorithms* 2nd ed, John Wiley and Sons, 1993.
- [66] Liapunov, A., *Stability of motion*, Academic Press, 1966.
- [67] Spivak, M., *Calculo en variedades*, Editorial Reverte, 1975.
- [68] Meziat, R., Egozcue, J. & Pedregal, P., *From a non-linear non-convex formulation to a linear convex formulation of non-convex variational problems*, *Journal of Applied Mathematics and Optimization*, vol 47, 27-44, 2003.
- [69] Meziat, R., Egozcue, J. & Pedregal, P., *The method of moments for non-convex variational problems*, in *Advances in Convex Analysis and Global Optimization, Nonconvex Optimization and its Applications Series*, vol. 54, 371-382, 2001.

Agradecimientos

Esta investigación fue posible gracias al apoyo de las siguientes instituciones:

- Fundación para el Apoyo a la Investigación y la Tecnología.
- Centro Internacional de Métodos Numéricos para la Ingeniería, Barcelona, España
- Grupo de Investigación OMEVA, Universidad de Castilla la Mancha, Ciudad Real, España
- Facultad de Ciencias de la Universidad de los Andes
- Departamento de Matemáticas de la Universidad de los Andes

Una especial colaboración prestaron las siguientes personas:

- Dr. Eugenio Oñate, Director CIMNE, Barcelona
- Dr. Ernesto Aranda, Departamento de Matemáticas, Universidad de Castilla la Mancha
- Dr. Pablo Pedregal, Director Departamento de Matemáticas, Universidad de Castilla la Mancha
- Dr. José Ma. Rolando Roldán, Decano, Facultad de Ciencias, Universidad de los Andes
- Dr. Carlos Montenegro, Director Departamento de Matemáticas, Universidad de los Andes