

---

# Analysis of Microstructures and Phase Transition Phenomena

René J. Meziat

Jorge Villalobos

Departamento de Matemáticas

# Plan

---

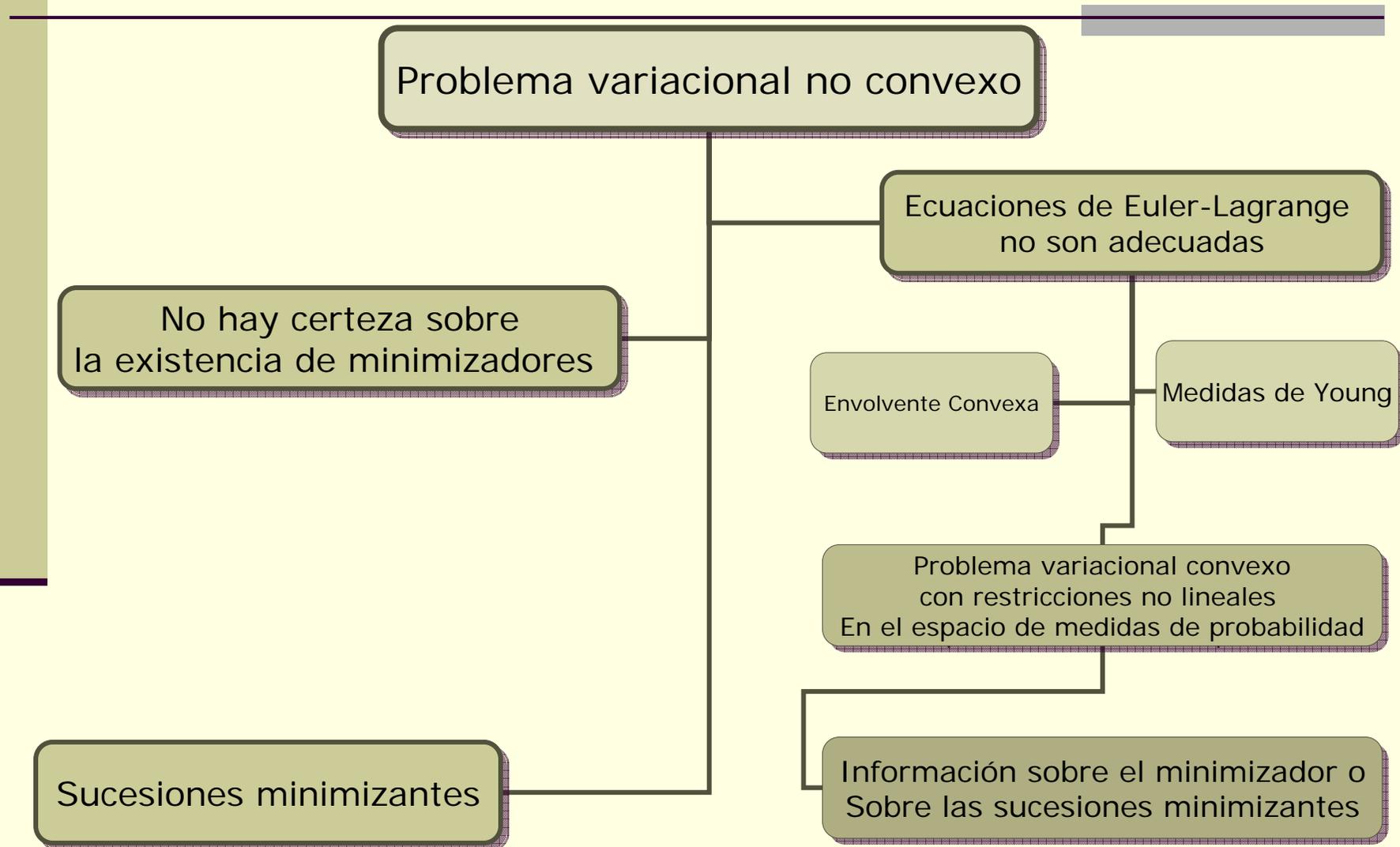
- Introducción
- Medidas de Young
- Solución vía programación no lineal
- Implicaciones físicas
- Conclusiones

# Introducción (1/4)

---

- Método general para determinar microestructuras en barras elásticas unidimensionales cuyo potencial de deformación es no convexo
  - Principios variacionales no convexos
  - Teoría de medidas de Young
  - Análisis convexo
  - Resultados clásicos de la teoría de momentos

# Introducción (2/4)



# Introducción (3/4)

## ■ Problema general

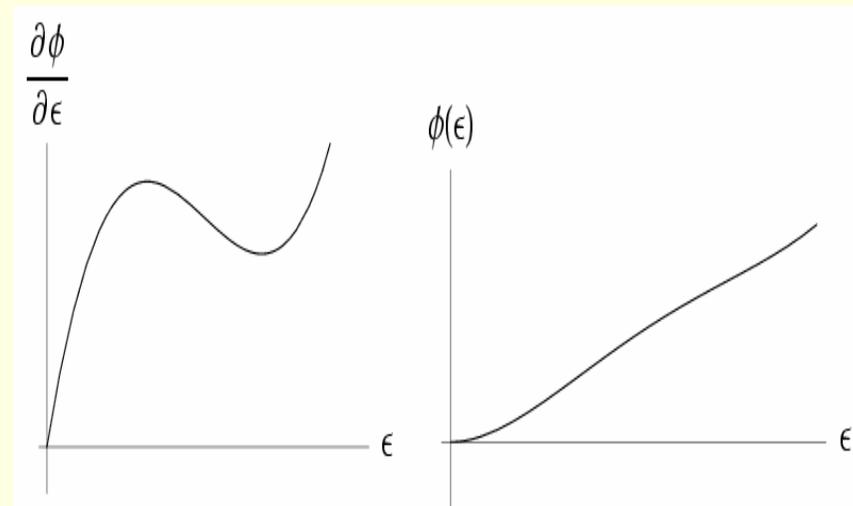
- $u$  es el desplazamiento de cada punto con respecto a la posición inicial
- $u'$  la deformación unitaria
- $\phi$  energía interna de deformación
- $\psi$  potencial de fuerzas externas

$$\min_u \int_0^1 \{\phi(x, u') + \psi(x, u)\} dx$$

$$\text{s.a. } u' \geq 0$$

$$u(0) = 0, u(1) = \alpha$$

- ## ■ Curva esquemática de un potencial de deformación típico para un acero de bajo carbono



# Introducción (4/4)

---

- Se hace el análisis de modelos generales donde la dependencia no convexa de  $\phi$  en  $u'$  se puede describir por una expresión polinomial

$$\phi(x, \lambda) = \sum_{k=0}^K c_k(x) \lambda^k,$$
$$c_K > 0, K > 1$$

# Medidas de Young (1/8)

## generalización en medidas

- El problema general se puede transformar a un nuevo problema generalizado definido sobre conjuntos de medidas parametrizadas
- Cada medida  $\mu_x$  es una distribución de probabilidad soportada en los reales
- El nuevo problema
  - Siempre tiene minimizador, aun si el original no lo tiene.
  - Es una **relajación** (ambos comparten el mismo ínfimo)

$$\min_u \int_0^1 \{\phi(x, u') + \psi(x, u)\} dx$$

s.a.  $u' \geq 0$

$$u(0) = 0, u(1) = \alpha$$

$$v = \{\mu_x : 0 \leq x \leq 1\}$$
$$\min_v \int_0^1 \left\{ \int_{\mathbb{R}} \phi(x, \lambda) d\mu_x(\lambda) + \psi(x, u) \right\} dx$$

s.a.  $u'(x) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_x(\lambda)$

$$u(0) = 0, u(1) = \alpha$$

# Medidas de Young (2/8)

## relación entre soluciones

- El problema original tiene minimizador si la solución del generalizado consiste solamente de deltas de Dirac
- Si el problema original no tiene minimizador, existe al menos una región  $I$  donde la medida parametrizada óptima está soportada en dos puntos. Esta solución determina el comportamiento oscilatorio de las sucesiones minimizantes del problema original

$$\mu_x^* = \delta_{s(x)} \text{ para cada } x \in [0,1]$$

$$\mu_x^* = p_1(x)\delta_{s_1(x)} + p_2(x)\delta_{s_2(x)}$$

$$p_1(x) + p_2(x) = 1 \quad \text{para cada } x \in I$$

$$p_j(x) > 0$$

# Medidas de Young (3/8)

## soluciones y sucesiones

- Los valores  $p_j(x)$  y  $s_j(x)$  determinan el comportamiento oscilatorio de las sucesiones minimizantes
- Dada una sucesión minimizante  $u_n$  arbitraria del problema original, la derivada de esta debe aproximarse a uno de los valores  $s_j(x)$  manteniendo las proporciones  $p_j(x)$
- Esto y el hecho ninguna medida puede estar soportada en el semieje negativo permite formular el problema generalizado como:  $\longrightarrow$

$$\mu_x^* = p_1(x)\delta_{s_1(x)} + p_2(x)\delta_{s_2(x)}$$

$$p_1(x) + p_2(x) = 1 \quad \text{para cada } x \in I$$

$$p_j(x) > 0$$

$$\min_v \int_0^1 \left\{ \int_0^\infty \phi(x, \lambda) d\mu_x(\lambda) + \psi(x, u) \right\} dx$$

$$\text{s.a. soporte}(\mu_x) \subset [0, \infty]$$

$$u'(x) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_x(\lambda)$$

$$u(0) = 0, u(1) = \alpha$$

$$\text{para cada } x \in [0, 1]$$

# Medidas de Young (4/8)

## problema a solucionar

- El que tenga forma polinomial nos permite escribir el problema original como el siguiente problema de optimización semidefinido: →
- Las nuevas variables de control  $\mathbf{m}$  deben pertenecer al conjunto convexo cuyos elementos son los momentos algebraicos de una medida de probabilidad soportada en el semieje positivo.
- Esta caracterización se hace exigiendo que las matrices de Hankel formadas por  $\mathbf{m}$  sean semidefinidas positivas.

$$\min_{\mathbf{m}} \int_0^1 \left\{ \sum_{k=0}^K c_k(x) m_k(x) + \psi(x, u) \right\} dx$$

$$\text{s.a. } u'(x) = m_1(x),$$

$$u(0) = 0, u(1) = \alpha,$$

$$m_0(x) = 1,$$

$$\left( m_{i+j}(x) \right)_{i,j=0}^{\frac{K}{2}} \geq 0,$$

$$\text{y } \left( m_{i+j+1}(x) \right)_{i,j=0}^{\frac{K}{2}-1} \geq 0, \text{ para } K \text{ par}$$

$$\text{ó } \left( m_{i+j}(x) \right)_{i,j=0}^{\frac{K-1}{2}} \geq 0$$

$$\text{y } \left( m_{i+j+1}(x) \right)_{i,j=0}^{\frac{K-1}{2}} \geq 0, \text{ para } K \text{ impar}$$

# Medidas de Young (5/8)

## ventajas

---

- El nuevo problema es un problema de optimización convexo lineal en las variables  $\mathbf{m}$ , por lo tanto la existencia de su minimizador está garantizada.
- La no linealidad está en las restricciones impuestas por la caracterización de los momentos.
- La forma que ha tomado el problema es ideal para solucionar con algoritmos y software para programas matemáticos convexos no lineales.
- **La solución del problema relajado nos indica si el problema original tiene solución o no.**

# Medidas de Young (6/8)

## Resultados

---

- **Teorema 1:** El valor mínimo del problema relajado coincide con el ínfimo del problema original
- **Teorema 2:** Los elementos del vector  $\mathbf{m}^*(x)$  que solucionan el problema relajado son los momentos algebraicos de la medida de Young parametrizada óptima  $\mu_x^*$  que soluciona la formulación generalizada

# Medidas de Young (7/8)

## Resultados

---

- **Lema 1:** Sea  $\mathbb{M}$  un espacio de medida regular de Borel definido sobre un conjunto de Borel  $\Omega$  dentro de un espacio euclidiano y  $f$  una función continua en  $\Omega$ . Entonces, para cada distribución de probabilidad  $\mu$  en  $\mathbb{M}$ , podemos aproximar el valor esperado  $\int_{\Omega} f d\mu$  por una secuencia de integrales de  $f$  contra medidas de probabilidad discretas en  $\mathbb{M}$

# Medidas de Young (8/8)

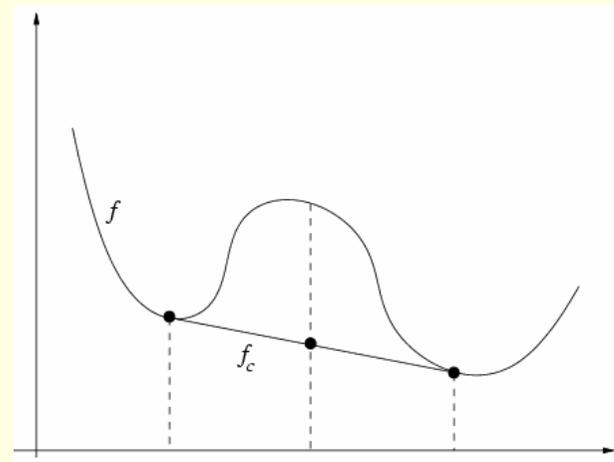
## Resultados

- **Lema 2:** La solución  $m^*$  del programa semidefinido es el vector formado por los primeros  $K+1$  momentos algebraicos de la medida óptima:

$$\mu_x^* = p_1 \delta_{s_1} + p_2 \delta_{s_2}$$

- **Lema 3:** La envolvente convexa de  $\phi$ ,  $\phi_c$ , en el punto  $t$  se puede describir como

$$\phi_c(t) = \min_{\mathbf{m}} \sum_{k=0}^K c_k m_k$$



# Solución vía programación no lineal (1/3)

- Como ejemplo proponemos solucionar el siguiente problema variacional:

$$\min_u \int_0^1 \left\{ f(u') + \left( u(x) - \frac{1}{2}x \right)^2 \right\} dx$$

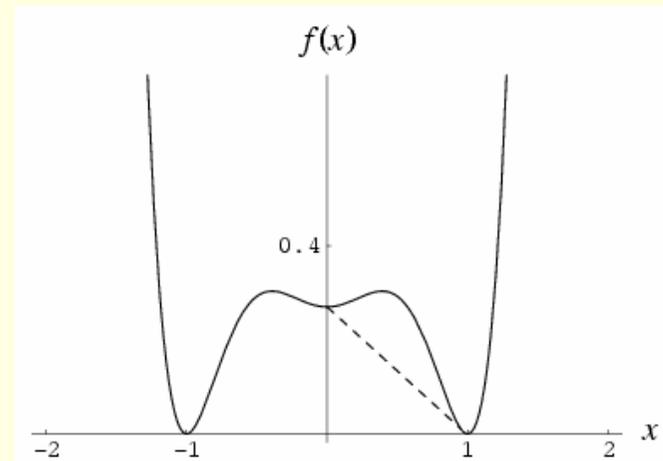
$$\text{s.a. } u'(x) \geq 0$$

$$u(0) = 0, u(1) = \frac{1}{2}$$

- Donde

$$f(x) = x^6 - \frac{173}{100}x^4 + \frac{23}{50}x^2 + \frac{27}{100}$$

- La gráfica de  $f$  y su envolvente convexa se puede apreciar en la figura



# Solución vía programación no lineal (2/3)

- La formulación en momentos (discreta) es:

$$\min_{\mathbf{m}} \Delta \sum_{i=1}^N \left( \frac{27}{100} + \frac{23}{50} m_2(x_i) - \frac{173}{100} m_4(x_i) + m_6(x_i) + \left( \Delta \sum_{j=1}^i m_1(x_j) - \frac{\Delta}{2} i \right)^2 \right)$$

$$\text{s.a. } \sum_{i=1}^N m_1(x_i) = \frac{u(1) - u(0)}{\Delta} = \frac{1}{2\Delta},$$

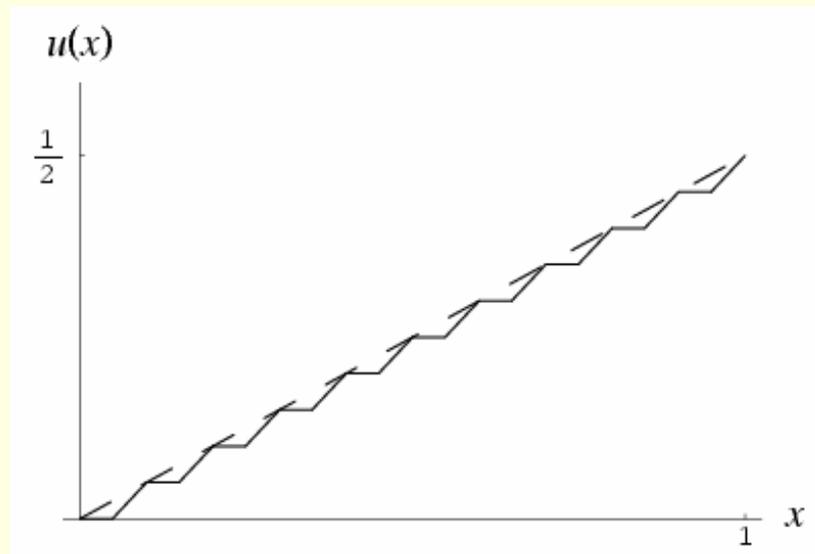
$$\begin{pmatrix} m_1(x_i) & m_2(x_i) & m_3(x_i) \\ m_2(x_i) & m_3(x_i) & m_4(x_i) \\ m_3(x_i) & m_4(x_i) & m_5(x_i) \end{pmatrix} \geq 0,$$

$$\begin{pmatrix} 1 & m_1(x_i) & m_2(x_i) & m_3(x_i) \\ m_1(x_i) & m_2(x_i) & m_3(x_i) & m_4(x_i) \\ m_2(x_i) & m_3(x_i) & m_4(x_i) & m_5(x_i) \\ m_3(x_i) & m_4(x_i) & m_5(x_i) & m_6(x_i) \end{pmatrix} \geq 0$$

# Solución vía programación no lineal (3/3)

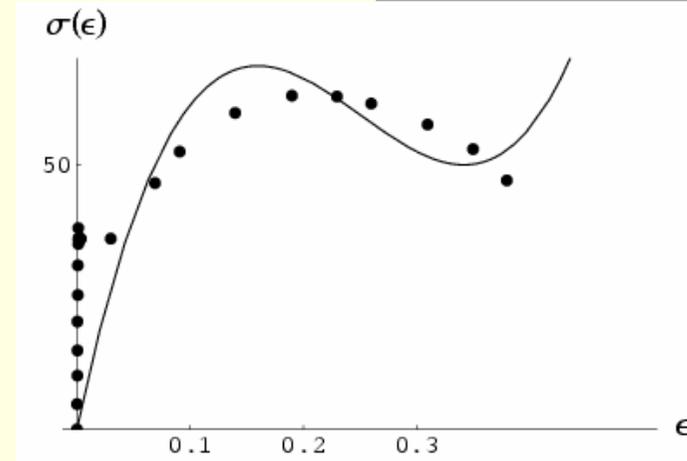
- Que tiene como solución la medida óptima:
- Esto implica que el problema original no tiene minimizador y su sucesión minimizante se debe comportar alternando pendientes de 0 y 1 con igual porcentaje, tal como se aprecia en la figura

$$\mu_x^* = \frac{1}{2} \delta_0 + \frac{1}{2} \delta_1$$



# Implicaciones físicas (1/5)

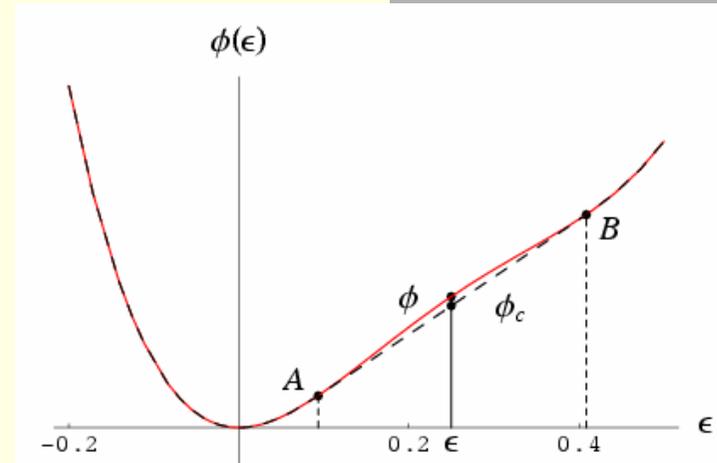
- Una aplicación de este método es el cálculo de la microestructura de un material a partir de la curva esfuerzo-deformación que se obtiene de este experimentalmente
- El esfuerzo es la derivada del potencial de deformación  $\phi$  con respecto a la deformación unitaria  $\varepsilon$



$$\frac{\partial \phi(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} = 6195.87\varepsilon^3 - 4664.61\varepsilon^2 + 1016.64\varepsilon$$

# Implicaciones físicas (2/5)

- El potencial de deformación  $\phi$  y su envoltura convexa  $\phi_c$  se aprecian en la figura
- Desde un punto de vista geométrico vemos que el punto  $(\varepsilon, \phi_c(\varepsilon))$ , sobre la envoltura convexa, presenta una configuración energética más estable que la del punto  $(\varepsilon, \phi(\varepsilon))$  que está sobre el potencial
- El punto  $(\varepsilon, \phi_c(\varepsilon))$  es una combinación convexa de los puntos  $A$  y  $B$



$$(\varepsilon, \phi_c(\varepsilon)) = p_1 A + p_2 B,$$
$$p_1, p_2 > 0 \text{ y } p_1 + p_2 = 1$$

# Implicaciones físicas (3/5)

---

- El punto  $(\varepsilon, \phi_c(\varepsilon))$  solamente se puede obtener como combinación convexa de los puntos  $A$  y  $B$ , esto quiere decir que al solucionar el problema relajado se obtendrá una distribución de probabilidad soportada en dos puntos  $\mu_x^* = p_1 \delta_{s_1} + p_2 \delta_{s_2}$
- Los puntos de soporte  $s_j(x)$  y sus probabilidades  $p_j(x)$  permiten inferir la proporción en que se mezclan los estados energéticos  $A$  y  $B$  para producir un menor valor de energía global

# Implicaciones físicas (4/5)

- Solucionamos el siguiente problema variacional:

- Donde

$$\phi(u') = 1548.97u'^4 - 1534.87u'^3 + 508.319u'^2$$

- La solución es la medida

$$\mu_x^* = \delta_{0.093} \text{ para } x \in [0, 0.5]$$

$$\mu_x^* = \delta_{0.408} \text{ para } x \in (0.5, 1]$$

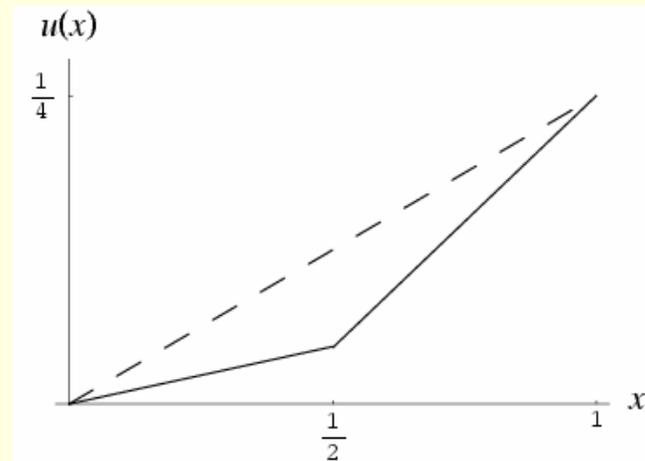
- Que nos dice que el minimizador es

$$u^*(x) = \begin{cases} 0.093x & \text{para } x \in [0, 0.5] \\ 0.0408x - 0.158 & \text{para } x \in (0.5, 1] \end{cases}$$

$$\min_u \int_0^1 \{ \phi(u') + u(x)^2 \} dx$$

$$\text{s.a. } u'(x) \geq 0$$

$$u(0) = 0, u(1) = \frac{1}{4}$$



# Implicaciones físicas (5/5)

- Solucionamos el siguiente problema variacional:

- Donde

$$\phi(u') = 1548.97u'^4 - 1534.87u'^3 + 508.319u'^2$$

- La solución es la medida

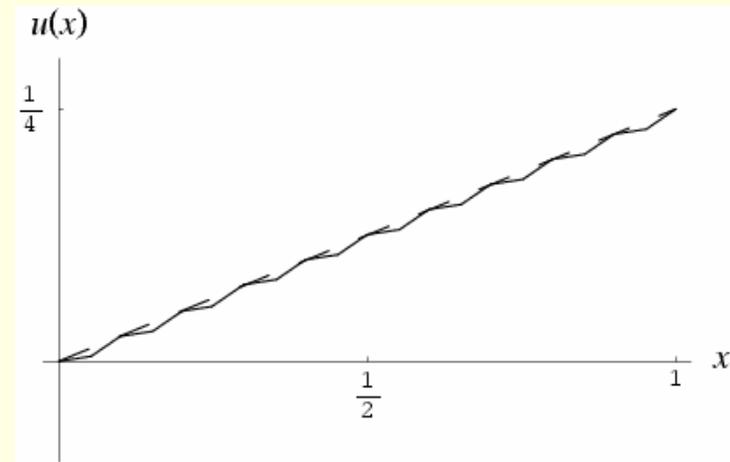
$$\mu_x^* = 0.525\delta_{0.093} + 0.475\delta_{0.418} \text{ para } x \in [0,1]$$

- Que nos dice que el minimizador es el que se muestra en la figura

$$\min_u \int_0^1 \left\{ \phi(u') + \left( u(x) - \frac{1}{4}x \right)^2 \right\} dx$$

$$\text{s.a. } u'(x) \geq 0$$

$$u(0) = 0, u(1) = \frac{1}{4}$$



# Conclusiones

---

- Aplicación de la teoría de medidas de Young para encontrar minimizadores de problemas variacionales no convexos
- Las medidas se han utilizado para predecir el balance energético óptimo para una barra metálica unidimensional en el régimen de elasticidad no lineal