

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO PROGRAMA DE MAESTRÍA Y DOCTORADO EN CIENCIAS MATEMÁTICAS Y DE LA ESPECIALIZACIÓN EN ESTADÍSTICA APLICADA

HOMOGENEIZACIÓN Y CÁLCULO DE COEFICIENTES EFECTIVOS DE MEDIOS CONDUCTIVOS CON MÚLTIPLES ESCALAS Y CONTACTO IMPERFECTO ENTRE LAS FASES

TESIS QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE: DOCTOR EN CIENCIAS

PRESENTA: ERNESTO IGLESIAS RODRÍGUEZ

DIRECTOR DE LA TESIS DR. JULIÁN BRAVO CASTILLERO (IIMAS, UNAM)

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR DR. FEDERICO JUAN SABINA CISCAR (IIMAS, UNAM) DR. RICARDO LINO MANSILLA CORONA (CEIICH, UNAM)

CIUDAD DE MÉXICO, 8 de mayo de 2022.



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

7

" De todas partes se eleva un clamor (...) se pide urgentemente la educación científica. " "¡Tal parecemos viajeros perdidos en un bosque inmenso - por tantos otros hombres habitado! " José Martí, La América (1883)

> " Nuestras alas presienten el vuelo de la ciencia, el amor y el deber " Canto a la Universidad (Himno oficial de la UNAM)

Agradecimientos

Agradezco infinitamente a mi familia. A todos los llevo en el corazón. A Yarilis y su familia, de quienes me siento parte.

Agradezco a Julián, amigo y maestro, y a Manuel Cruz, a quienes debo sus consejos, ánimo y simpatía. Al colectivo de la UNAM, en especial de este entrañable posgrado. A todos los amigos y colegas, que no les he podido dedicar el tiempo que merecen.

Reciban todo mi afecto y agradecimiento. Gracias también a quienes lean y vean utilidad en nuestro esfuerzo.

Las figuras mostradas en esta obra fueron creadas por el autor y están bajo una licencia Creative Commons Reconocimiento 4.0. Usted es libre de compartir (copiar y redistribuir) y adaptar (remezclar, transformar y construir) dichas figuras para cualquier propósito. Licencia aceptable para Obras Culturales Libres, no se pueden revocar estas libertades en tanto se sigan los términos de la licencia.



Declaro conocer el Código de Ética de la Universidad Nacional Autónoma de México, plasmado en la Legislación Universitaria. Con base en las definiciones de integridad y honestidad ahí especificadas, aseguro mediante mi firma al calce que el presente trabajo es original y enteramente de mi autoría. Todas las citas de, o referencias a, las obras de otros autores aparecen debida y adecuadamente señaladas, así como acreditadas mediante los recursos editoriales convencionales.

Ernesto Iglesias Rodríguez

Abstract

In the present work, the problem of the effective thermal conductivity is studied for composite materials dependent on various microstructural scales with imperfect contact conditions at the interfaces. Strong and weak formulations are obtained for the heat equation problem and the methodology of reiterated homogenization is developed analyse the effective behavior of the medium. This method allows to find the effective properties of the homogenized medium from a series of Local Problems. These problems were solved analytically for one-dimensional (laminated) and two-dimensional (considering circular cross-sections) cases. For more general cases, a combination of Asymptotic Homogenization, Finite Element and Domain Decomposition methods was implemented for the numerical solution. Finally, we analyze the influence of the geometry and distribution of the inclusions on the effective coefficient in specific cases and the property gain, of the effective thermal conductivity in nanofluids, resulting from considering two microscales instead of one. Such gain was shown to depend on interfacial resistance and aggregation.

Resumen

En este trabajo se estudia el problema de la conductividad térmica efectiva de materiales compuestos dependientes de varias escalas microestructurales con condiciones de contacto imperfecto (barrera térmica) en las interfaces. Se obtuvieron formulaciones fuertes y débiles para el problema de la ecuación del calor y se aplicó el Método de Homogeneización Asintótica Reiterada para el análisis del comportamiento efectivo del medio. Este método permite hallar las propiedades efectivas del medio homogeneizado a partir de la solución de Problemas Locales recurrentes en las distintas escalas.

El procedimiento formal presentado se justifica matemáticamente garantizando la solución del problema en sus dos formulaciones. Estos problemas fueron resueltos analíticamente en un caso unidimensional (laminados) y en uno bidimensional (considerando secciones transversales circulares). Para casos más generales se implementaron algoritmos combinados de los Métodos de Homogeneización Asintótica, Elementos Finitos y Descomposición de Dominio para la solución numérica de los problemas locales. En este trabajo se muestran diferentes aplicaciones de la metodología propuesta, analizando la influencia de la geometría y distribución de las inclusiones en el coeficiente efectivo en casos específicos.

Finalmente se demostró la ganancia de propiedades resultante de considerar dos microescalas en lugar de una. Se demostró que dicha ganancia depende de la resistencia interfacial y de la agregación. El procedimiento descrito en este trabajo es aplicable a múltiples compuestos conductivos con estructuras periódicas con posibles generalizaciones a dominios perforados y estructuras reticuladas.

Índice general

Preámbulo Resumen					
I	Fur	ndamentos	1		
1.	Intr	oducción	2		
	1.1.	Motivación	3		
	1.2.	Conducción de calor y homogeneización	3		
	1.3.	Objetivos	4		
		1.3.1. Estructura de la tesis	5		
2.	For	mulación del problema	7		
	2.1.	Problema Físico	8		
		2.1.1. Geometría	8		
		2.1.2. Condiciones de contacto	10		
	2.2.	Formulación analítica	12		
		2.2.1. Método de Homogeneización	13		
	2.3.	Formulación variacional	15		
		2.3.1. Algunas notas sobre espacios de Sobolev	15		
		2.3.2. Planteamiento del problema variacional	18		
3.	Fun	damentación Matemática	21		
	3.1.	Principios variacionales	21		
	3.2.	Lemas de Existencia y Unicidad	23		
		3.2.1. Condiciones de contacto perfecto	26		
		3.2.2. Condiciones de contacto imperfecto	26		
	3.3.	Conceptos básicos del análisis asintótico	28		
	3.4.	Justificación del Método de Elementos Finitos	30		

II Resultados

4.	Hor	nogeneización multiescala	34
	4.1.	Problemas locales y coeficientes efectivos	36
	4.2.	Soluciones analíticas en un caso unidimensional	40
		4.2.1. Caso particular trifásico	43
	4.3.	Soluciones analíticas en un caso bidimensional utilizando funciones elípticas	46
		4.3.1. Obtención de los coeficientes indeterminados	50
		4.3.2. Fórmulas analíticas aproximadas para el coeficiente efectivo	54
		4.3.2.1. Truncamiento de primer orden	56
		4.3.2.2. Truncamiento de segundo orden	57
		4.3.2.3. Truncamientos de orden superior	58
	4.4.	Validación	59
		4.4.1. Modelos laminados multiescala	59
		4.4.1.1. Aplicación a nanofluidos	60
		4.4.1.2. Comparación entre modelos:	62
		4.4.2. Validación en compuestos fibrosos	64
		4.4.3. Comparación del caso bidimensional con un medio trifásico	68
5.	Mét	todo de los elementos finitos	72
	5.1.	Homogeneización y Elementos Finitos	72
	5.2.	Base teórica del Método de Elementos Finitos	73
		5.2.1. Elementos, nodos y funciones de forma	73
		5.2.2. Procedimiento de FEM	74
	5.3.	Método de Descomposición de Dominio	75
		5.3.1. Formulación variacional	77
	5.4.	Resultados numéricos	78
		5.4.1. Aplicación a compuestos fibrosos generales	78
		5.4.2. Aplicación a inclusiones esféricas	81
6.	Apl	icaciones de la Homogeneización Reiterada	82
	6.1.	Microfibras difusas y nanoreforzadas	82
		6.1.1. Modelo multi-laminado	83
		6.1.2. Medio fibroso multi-escala	87
	6.2.	Ganancia	88
		6.2.1. Ganancia 1D	89
		6.2.2. Ganancia 2D	91
		6.2.3. Soluciones numéricas	94
7.	Con	nclusiones y recomendaciones	95
	7.1.	Logros	95
	7.2.	Publicaciones	96
	7.3.	Recomendaciones	97

33

Apéndices

Software empleado			
A.1. FreeFEM++ (resolución de formulación variacional)		99	
A.2. GMSH (generación de mallas)		99	
A.3. Repositorio digital de software		100	
B. Simplificación de los problemas locales ante simetrías	-	101	
B.1. Ejemplo		102	
B.2. Coeficientes suaves		104	
B.3. Coeficientes discontinuos		106	
C. Sobre la convergencia de sistemas infinitos	-	108	
C.1. Caso de interés		110	
Bibliografía	-	111	

99

Nomenclatura

En cada capítulo, los teoremas, los corolarios, los problemas de frontera y las figuras se numeran de forma consecutiva desde el inicio hasta el final. El símbolo \Box indicará el fin de una demostración.

Las notaciones para los operadores y variables siguen principalmente a [1, 2], aunque la mayor parte de la metodología siguen los trabajos [3, 4]. En este trabajo se hace, además, un uso extensivo del *convenio de suma de Einstein* donde los índices repetidos indican sumatoria. Es decir:

$$a_i b_i = \sum_{i=1}^n a_i b_i = a_1 b_1 + \dots + a_n b_n.$$

La función indicadora de un conjunto W, se define como $\mathbf{1}_{x \in W}(x) = \begin{cases} 1, & x \in W \\ 0, & x \notin W \end{cases}$.

El producto escalar entre dos vectores u, v de un espacio euclídeo V se denotará mediante

 $[u,v]_V.$

En \mathbb{R}^n se define la norma $\|\cdot\|_2$ de la forma

$$\xi \in \mathbb{R}^n : \|\xi\|_2^2 = [\xi, \xi] = \sum_{i=1}^n \xi_i^2.$$

Reservaremos los paréntesis angulares $\langle \cdot \rangle$ para el operador de *promediación* o *promedio*, i.e., para un dominio acotado $Q \subset \mathbb{R}^n$:

$$\langle F \rangle_Q = \frac{1}{|Q|} \int_Q F(x) \, dx, \quad \text{donde } |Q| = \int_Q dx.$$

El operador *contraste* sobre una superficie Γ (curva o punto en los casos 2D y 1D, respectivamente) se define por la diferencia de los valores límite de la función a ambos lados de la misma, es decir:

$$\llbracket f(y) \rrbracket \Big|_{y \in \Gamma} = \lim_{\xi \to y^+} f(\xi) - \lim_{\xi \to y^-} f(\xi).$$

Denotaremos por $\mathcal{L}^p = \mathcal{L}^p(Q), (p \ge 1)$, el espacio de Lebesgue con norma

$$\|\cdot\|_p = \left(\int_Q |\cdot|^p\right)^{1/p}.$$

Denotaremos por \mathcal{L}^{∞} al espacio de funciones *esencialmente acotadas* (el conjunto donde no están acotadas tiene medida de Lebesge cero). En particular, en el espacio \mathcal{L}^2 , se considerará el producto escalar canónico

$$[f,g] = \int_Q f(x)g(x)dx.$$

Utilizaremos la *notación de Landau* para la comparación asintótica de funciones, es decir, $o(\cdot) \ge O(\cdot)$ en el sentido siguiente:

Sean $M \in \mathbb{R}^n$, B un espacio normado y dos funciones $f, \phi : M \times \mathbb{R} \to B$, diremos que la función f es o grande de ϕ en la norma de B, y se denota por

$$f(x,\varepsilon) = O(\phi(x,\varepsilon))$$
 cuando $\varepsilon \to 0$,

si y solo si, *existen* constantes reales positivas $A, \delta > 0$ tales que, *para todo* $0 < \varepsilon < \delta$:

$$||f(x,\varepsilon)||_B \le A ||\phi(x,\varepsilon)||_B \quad \forall x \in M.$$

Se dice que f es o pequeña de ϕ en la norma de B, y se denota por

$$f(x,\varepsilon) = o(\phi(x,\varepsilon))$$
 cuando $\varepsilon \to 0$,

si y solo si,

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \frac{\|f(x,\varepsilon)\|_B}{\|\phi(x,\varepsilon)\|_B} = 0.$$

Esto es equivalente a que la desigualdad anterior sea estricta y se cumpla para todo A > 0.

Siempre que no se especifique supondremos $\varepsilon \to 0$. Por ejemplo: $f(x, \varepsilon) = O(1)$ significa que f está acotada y la cota no depende de ε , y $g(x, \varepsilon) = o(1)$ significa que $g \to 0$ cuando $\varepsilon \to 0$.

Abreviaturas

M.H.A.	Método de Homogeneización Asintótica.
H.R.	Homogeneización Reirerada.
s.a.f.	Solución asintótica formal.
e.a.	Expansión asintótica.
FEM	Método de los Elementos Finitos. *
DDM	Método de Descomposición de Dominio. *
GMRES	Método de Residuo Mínimo Generalizado. *
1D, 2D, 3D	Referentes a 1, 2 y 3 dimensiones, respectivamente.

* Siglas provenientes del inglés que, por su uso cotidiano en la literatura, se ha preferido mantener en dicho idioma (la omisión de la puntuación es intencional).

Constantes y variables

- ε Parámetro pequeño. Un número positivo ($\varepsilon > 0$) que se considera mucho menor que 1. También representa el cociente entre longitudes características de dos escalas (macroscopica, microscopica, nano u otras, veease Sec. 2.1).
- x, y, z, ξ Variable lenta (x) y variables rápidas $(\xi = y, z)$: $y = \frac{x}{\varepsilon}, \quad z = \frac{x}{\varepsilon^2}.$
- $u^{\varepsilon}, u, \tilde{u}$ Se utilizan para hacer referencia a soluciones de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales, el superíndice indica una dependencia directa respecto al parámetro:

$$u^{\varepsilon}(x) = u(x,\varepsilon).$$

 $N = \chi_{y}^{j}, \chi^{j}$ Denotarán las soluciones de los *Problemas Locales* (ver Sec. 2.2.1).

Functiones y regiones

- $A^{\varepsilon}, A(a_{ij}^{\varepsilon}), (a_{ij})$ Matriz de coeficientes de conductividad y sus componentes. El superíndice ε es utilizado para enfatizar su dependencia respecto a ε y su ausencia para expresar su dependencia respecto a las variables rápidas, e.g. (x, x)

$$a_{ij}^{\varepsilon}(x) = a_{ij}\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{x}{\varepsilon^2}\right)$$

 A^{ε} está definida en Ω y A se considera doblemente periódica. Los coeficientes de conductividad representan las propiedades del medio en cada punto.

- $\hat{A}, (\hat{a}_{ij})$ Matriz de coeficientes efectivos y sus componentes. Representa las propiedades macroscópicas del medio.
- $A^1, (a_{ij}^1)$ Matriz de coeficientes efectivos de la segunda escala y sus componentes. Depende solamente de la variable rápida de dicha escala (y).

Functiones y regiones (cont.)

W = Y, Z Las letras mayúsculas W, Y, Z denotarán regiones en \mathbb{R}^n (n = 1, 2 ó 3) formadas por el producto cartesiano de intervalos reales:

$$Y = (l_1, l'_1) \times \ldots \times (l_n, l'_n), \quad Z = (\ell_1, \ell'_1) \times \ldots \times (\ell_n, \ell'_n)$$

A estas regiones se les conoce también como *ortotopos* y serán usadas en el texto para representar las *celdas periódicas* (vease Sec. 2.1).

.(i) El superíndice entre paréntesis se utiliza en este texto en medios multifásicos, para indicar las diferentes fases o materiales constituyentes (e.g. $W^{(1)}$ representa la parte de W correspondiente al medio 1, $a_{ij}^{(2)}$ es el valor del coeficiente a_{ij} en el medio 2).

> En el contexto de las series asintóticas se utiliza como notación simplificada para sumas parciales:

$$u^{(M)} = \sum_{i=0}^{M} \varepsilon^{i} u_{i}(x,\varepsilon), \quad u^{(\infty)} = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^{i} u_{i}(x,\varepsilon).$$

- $\Gamma, \Gamma^{\varepsilon}$ Superficie de contacto. Superficie limítrofe entre los materiales constituyentes del material compuesto que ocupa la región Ω . En estas se encuentran todas las discontinuidades de los coeficientes y son distinguibles a nivel macroscópico.
- Γ_Z, Γ_Y Superficies de contacto locales. Γ_Z es la superficie donde se encuentran todas las discontinuidades de A en la celda periódica Z (primera escala microestructural) para cada y fijo, mientras que Γ_Y es la superficie donde se encuentran todas las discontinuidades de A^1 en la celda periódica Y (segunda escala).

Operadores

 $\begin{array}{lll} L,L_{p,q},L^{\varepsilon} & \mbox{Representan operadores lineales elípticos (véase Capítulo 4).} \\ L^1,L^2,L^3,L^4,L^5 & \mbox{Operadores lineales elípticos, se forman como combinación lineal de las anteriores. Se encuentran descritas en la ecuación (4-6).} \\ \nabla\cdot,\nabla & \mbox{El operador } \nabla\mbox{ representa el } gradiente \mbox{ de una función } F: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}, \\ \mbox{i.e.} & \nabla F(x_1,x_2,x_3) = \left(\frac{\partial F}{\partial x_1},\frac{\partial F}{\partial x_2},\frac{\partial F}{\partial x_3}\right). \\ \mbox{Por otra parte utilizaremos } \nabla\cdot\mbox{ para indica la } divergencia \mbox{ de una función } f: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n, \mbox{ i.e.} \\ & \nabla\cdot(f_1,f_2,f_3) = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} + \frac{\partial f_2}{\partial x_2} + \frac{\partial f_3}{\partial x_3}. \end{array}$

Unidades de medida

m	Metros (unidad de longitud).
kg	Kilogramo (unidad de masa).
s	Segundos (unidad de tiempo).
К	Kelvin (unidad de temperatura).
J	Jules (unidad de energía).
W	Vatio o Watt (unidad de potencia), $1W = 1J/s$.
	Se utiliza en la taza de transferencia de calor.
$ m kg/m^3$	Densidad.
$\mathrm{J/m^3}$	Densidad de energía.
W/m^2	Flujo de calor.
$\rm J/(kgK)$	Calor específico.
$J/(m^3K)$	Capacidad de calor específico.
$W/(m^2K)$	Coeficiente de transferencia de calor o <i>conductancia</i> .
W/(mK)	Conductividad térmica.
K/W	Resistencia térmica.

Parte I

Fundamentos

Capítulo 1

Introducción

El modelado multiescala tiene como objetivo apoyar al diseño de materiales avanzados por medio del calculo de sus propiedades efectivas y el estudio del comportamiento de un sistema complejo considerando su características físicas y geométricas a diferentes escalas de longitud (que pueden ir desde metros hasta nanometros) [5]. La idea de una escala natural para todo tipo de fenómenos es fundamental en diferentes disciplinas (matemática, física, química, biología, etc.). En física se suele considerar que las longitudes típicas de los fenómenos que ocurren en la misma escala son comparables, mientras que para escalas diferentes esta consideración no siempre es válida. Cuando todas las escalas participan e interactúan, las cosas tienden a complicarse y el comportamiento es aparentemente desordenado.

Consideraremos el caso en que la menor de las escalas es mucho mayor que las dimensiones moleculares pero mucho más pequeña que la longitud característica de la mayor de ellas. De esta forma, el medio se puede ver como un continuo en la escala microscópica, sujeto al análisis clásico, y se le pueden atribuir propiedades macroscópicas o efectivas [6] en cualquiera de sus escalas. Un material compuesto está formado por la distribución espacial de diferentes dominios ocupados, o bien por diferentes materiales considerados homogéneos a nivel supramolecular (conocidos como fases), o por un mismo material que se presenta en diferentes estados [7–9].

Los métodos de *homogeneización* proporcionan modelos matemáticos que permiten calcular las propiedades efectivas de un material compuesto a partir de las propiedades conocidas de los materiales constituyentes. Para cada constituyente se supone que se conocen de manera independiente sus propiedades físico -químicas (elásticas, piezoeléctricas, magnéticas, de reactividad, etc.) y geométricas (granulometría, porosidad, agregación, etc.) [10].

Recientemente [11], se ha analizado la aplicación de agregados finos y fibras híbridas en compuestos cementosos reforzados con fibras a diferentes temperaturas. Otras aplicaciones han sido desarrolladas en la medicina, para el estudio de la distribución térmica de tejidos malignos en oncología e histología [12] y su detección mediante termografías [13–15]. Una posible extensión de estos resultados en medicina es el estudio y diseño de detectores.

En el presente trabajo nos ocuparemos de las aplicaciones de esta rama de las matemáticas en medios heterogéneos, así como en el desarrollo de herramientas para el estudio y diseño de materiales con propiedades prescritas deseadas. Nos enfocaremos principalmente en problemas conductivos y materiales donde la presencia de escalas múltiples y fenómenos de contacto provocan el fallo de los métodos tradicionales.

1.1. Motivación

El cálculo de la conductividad térmica efectiva de materiales compuestos es un tema de interés debido a su importancia en las aplicaciones de transferencia de calor. El estudio del comportamiento de conducción efectivo de medios heterogéneos que exhiben varias escalas estructurales ha ganado un interés creciente. Por ejemplo, la conductividad térmica efectiva se ha estudiado en nanocompuestos [16–20] y en nanofluidos [21–26].

Por otro lado, los nanofluidos pueden considerarse como medios bifásicos en los que la existencia tanto de nanopartículas individuales como de aglomerados de nanopartículas. Además, se sabe que no solo el fenómeno de la agregación influye en el comportamiento de conducción de los nanofluidos, sino también la presencia de barreras térmicas [26–29]. Además, los nanofluidos bien dispersos muestran resultados inferiores [30,31] en comparación con los que presentan agregados [32]. Los agregados dotan naturalmente de una estructura de múltiples escalas (dos o más microescalas) al medio original, además, al brindar una mayor superficie de contacto aumenta la influencia de las barreras térmicas en el comportamiento efectivo. De hecho, la idea original de utilizar un método de homogeneización reiterado en estos trabajos se inspiró en el modelo *ad hoc* multiescala y contacto imperfecto formulado por [26] para investigar el comportamiento conductivo térmico efectivo de los nanofluidos.

1.2. Conducción de calor y homogeneización

En este trabajo, consideramos medios que contienen múltiples, variables y pequeñas heterogeneidades. Obtener el comportamiento efectivo a través de la aplicación directa de métodos numéricas es impracticable, ya que la discretización de dominio requerida es demasiado fina y no es posible garantizar la convergencia, además de un aumento considerable del costo computacional [33–38]. La principal alternativa es emplear una técnica de homogeneización matemática que permita encontrar dichas propiedades a partir del estudio de un material homogeneo equivalente [3,7,39].

La cuestión del cálculo de propiedades efectivas de medios no homogéneos con estructuras periódicas ya se había planteado en las obras clásicas de Poisson y Maxwell [40], Rayleigh [41], Voigt y Reuss [3,42]. El nombre de *homogeneización* fue introducido en la literatura matemática a principios de 1970 por Babuska [43–45], quien trabajaba un enfoque similar al de los trabajos anteriores de Sanchez-Palencia [46].

En particular, la *homogeneización reiterada* es una colección de técnicas matemáticas adecuadas para derivar coeficientes efectivos de medios heterogéneos multiescala. Los dos enfoques principales de la homogeneización reiterada consisten en utilizar expansiones asintóticas [4] y convergencia multiescala [47,48]. En este trabajo, empleamos el enfoque de expansiones asintóticas.

En [1,2] se aplicaron el método de homogeneización reiterada para investigar el comportamiento macroscópico del problema de conducción de calor de Fourier de forma fuerte con coeficientes periódicos y de oscilación rápida que dependen de tres escalas (una global y dos microestructurales) asumieron un contacto interfacial perfecto. En dicho caso se consideraron compuestos laminados, pero no se obtuvo ninguna mejora de la conductividad térmica efectiva debido a las microestructuras 1D elegidas. Sin embargo, [49] y obtuvieron una conductividad térmica efectiva mejorada para compuestos fibrosos y particulados combinando el método de homogeneización reiterada con fórmulas analíticas conocidas. Efectos similares se obtienen en [50, 51] para medios heterogéneos bidimensionales mediante homogeneización reiterada y elementos finitos.

La metodología utilizada por [1, 2] se extendió en [52, 53] para el estudio de nanofluidos considerándose los efectos de las barreras térmicas en las interfaces. Adicionalmente, en dichos trabajos [52, 53], el procedimiento formal para derivar el problema homogeneizado, los problemas locales y los coeficientes efectivos se describe para un problema tridimensional general.

1.3. Objetivos

En este proyecto de tesis nos enfrentamos al *problema* de obtener modelos matemáticos para determinar las propiedades efectivas de compuestos conductivos periódicos dependientes de varias escalas estructurales (mactro, micro y nano). Para el desarrollo de este trabajo se plantea la siguiente *hipótesis de trabajo*:

El método de homogeneización de múltiples escalas combinado con técnicas analíticas y numéricas, permite estudiar el comportamiento macroscópico o efectivo de dichos compuestos, a partir de la influencia de las características físicas y morfológicas de las constituyentes, así como del tipo de contacto entre estas.

Es por esto que se plantearon un objetivo general y varios objetivos específicos a cumplir.

Objetivo general:

Desarrollar un modelo matemático basado en los métodos de homogeneización reiterada para la caracterización de medios conductivos dependientes de dos escalas microestructurales y barrera térmica en las interfaces. Posteriormente, emplear métodos analíticos (e.g., de variable compleja) y numéricos (e.g., método de los elementos finitos) para calcular la conductividad térmica efectiva de algunas clases de esos medios.

Objetivos específicos:

- 1. Formular el problema conductivo (ecuación del calor estacionaria) generalizado dependiente de dos escalas microestructurales y sujeto a condiciones de contacto imperfecto en las interfaces como una familia de problemas elípticos con coeficientes periódicos y rápidamente oscilantes en función de un *parámetro pequeño*.
- 2. Aplicar el procedimiento formal de la homogeneización reiterada al problema definido en el Objetivo 1 para obtener problemas locales y resolverlos con métodos analíticos en casos donde sea posible (para algunos tipos de compuestos periódicos laminados y fibrosos).
- 3. Reformular el problema definido en el Objetivo 1 y los problemas locales obtenidos en el Objetivo 2 a su formulación variacional equivalente.
- 4. Desarrollar algoritmos que permitan resolver numéricamente los problemas variacionales obtenidos (Objetivo 3) mediante el método de elementos finitos e implementarlos utilizando herramientas de software libre (Apéndice A).

- 5. Justificar matemáticamente el procedimiento formal, garantizando la existencia de solución de los llamados problemas locales, y la proximidad entre la solución del problema homogeneizado y las soluciones de la familia de problemas definidas en el Objetivo 1.
- 6. Determinar las propiedades efectivas de diferentes materiales periódicos conductivos mediante la solución de problemas locales en una, dos y tres dimensiones, a partir de los modelos obtenidos en los Objetivos 2-4.

La originalidad de este trabajo se basa principalmente en el estudio de materiales periódicos dependientes de varias escalas microestructurales con condiciones de contacto imperfecto en las interfaces. El desarrollo y combinación de diferentes técnicas analíticas y numéricas permitió derivar el problema homogeneizado, los problemas locales, y los coeficientes efectivos de diferentes estructuras complejas. Fue posible analizar la influencia en el comportamiento efectivo de la concentración, conductividades de las fases y contacto imperfecto.

1.3.1. Estructura de la tesis

- **Capítulo 1** Se presentó una breve introducción al estudio de los materiales compuestos desde el punto de vista de la homogeneización, sus generalidades, y el problema de las escalas múltiples. Además, se ofrece una visión general de la temática y su estado actual, con el objetivo de crear las bases necesarias del conocimiento para comprender la necesidad del estudio y la concepción del método propuesto.
- **Capítulo 2** Se formula el problema de la conducción del calor estacionaria en un sólido y las ecuaciones fundamentales que describen dicho fenómeno. Se desarrolla un modelo para un material compuesto con escalas múltiples, considerando múltiples escalas y una barrera térmica interfacial entre las constituyentes.
- Capítulo 3 Abordaremos esta problemática a partir del Método de Homogeneización Asintótica y el Método de los Elementos Finitos, por lo que en el Capítulo 3 presentaremos la fundamentación matemática de ambos métodos. En particular se demuestra el lema empleado en el Capítulo 4 y la aproximación de la solución del problema homogeneizado a la solución exacta, así como la convergencia y estimación de errores de los métodos variacionales.
- Capítulo 4 Se utiliza la Homogeneización Reiterada para abordar el problema de las escalas múltiples en diferentes compuestos con distribución periódica, considerando una barrera térmica sobre la interfaz. Se presta especial atención a la obtención de los problemas locales y las propiedades efectivas. Además, se obtienen formulas analítica para dos casos simples: para compuestos laminados (Sec. 4.2) y fibrosos (Sec. 4.3).
- Capítulo 5 Para resolver los Problemas Locales generales se propone el Método de los Elementos Finitos. Esta técnica combinada Método de Descomposición de Dominio permitirá abordar el problema del contacto imperfecto mediante un esquema iterativo.
- **Capítulo 6** Se realizará un estudio de la aplicabilidad de ambos métodos y finalmente se presentará la simulación de un problema particular utilizando los elementos de ambas teorías, así como los resultados obtenidos en cada uno de ellos.

Capítulo 7 Se presentan las conclusiones de este trabajo, algunas recomendaciones y se muestran algunos ejemplos de investigaciones relacionadas con el tema en los que se está desempeñando el autor.

Al final de este trabajo se incluyen, a modo de apéndices, la información sobre el software desarrollado y otros resultados obtenidos durante la investigación. Adicionalmente, la figura 1-1 sugiere la relación entre los contenidos abordados en cada sección de esta tesis.



Figura 1-1: Relación entre los contenidos propuestos. De arriba hacia abajo, los precedentes facilitan la comprensión de los subsecuentes.

Capítulo 2

Formulación del problema

Generalmente los fenómenos físicos que ocurren en medios altamente heterogéneos presentan propiedades que varían en dependencia de las diferentes escalas de longitud. Además, la incorporación de nanopartículas se hace cada vez más presente en los materiales compuestos, lo que ha aumentado el interés en los nanocompuestos [16-18] y en nanofluidos [21-24, 26].

Existen varias ventajas de los nanofluidos con respecto a las suspensiones coloidales convencionales en diferentes ámbitos [27], en particular por el aumento de la conductividad térmica y la baja sedimentación. Por otra parte, la utilización de nanotubos de carbono (CNT) y nanofibras de carbono (CNF) mejoran significativamente muchas de las propiedades de los materiales compuestos sólidos [54]. Sin embargo en todos estos casos, dichas mejorías, se ve significativamente afectada por la uniformidad de la dispersión de las inclusiones (partículas, filamentos o fibras) en el interior del material aglutinante (comúnmente llamado matriz).

En particular, la conductividad térmica se puede mejorar significativamente con la formación de conglomerados de inclusiones [2, 26, 55–57]. A este fenómeno se le conoce como agregación. No obstante, los principales mecanismos que influyen en la conducción del calor en nanofluidos, nanofibras y fibras difusas aún continúan investigándose.

Los fenómenos de agregación y dispersión se relacionan directamente con el concepto de las escalas espaciales múltiples, y se ha comprobado que la conductividad térmica puede variar significativamente debido a estos efectos. En [26,57], se utilizaron resultados conocidos de diferentes teorías y se desarrolló un modelo de homogeneización ad-hoc para analizar el papel de la agregación y la barrera térmica en la conductividad térmica efectiva de nanofluidos y nanocompuestos. En [49,58,59], se aplicó el método de homogeneización reiterada a un problema de conducción de calor considerando las condiciones de continuidad para la temperatura y los flujos en las interfaces.

El objetivo del presente capítulo es extender los resultados reportados en [49, 58, 60] al caso de un material compuesto periódico bifásico (laminado o fibroso) en el que está presente una barrera térmica (o *contacto térmico imperfecto*) en las interfaces entre las constituyentes [53], conocidas también como *fases*.

Para cumplir el objetivo propuesto, primeramente, se presenta el marco geométrico en el que vamos a trabajar. Realizaremos la distinción entre escalas y las principales características, entre las cuales destaca la posibilidad de un contacto imperfecto entre las fases. Además, se formula el problema estudiado desde el punto de vista clásico, como un problema de Dirichlet (formulación fuerte), proponiendo una adimensionalización conveniente de las magnitudes

involucradas. Finalmente, reformularemos este problema desde el punto de vista variacional (formulación débil), lo cual permite un acercamiento más general a sus soluciones.

2.1. Problema Físico

La idea de una escala natural para todo tipo de fenómenos es fundamental en la Física. Cuando sólo una escala natural está involucrada se pueden establecer leyes simples que rigen el comportamiento del material. Sin embargo, cuando todas las escalas participan e interactúan, aparecen complejidades dificiles de capturar en dichos modelos. Intentar modelar el comportamiento en la menor escala posible, cuando la escala natural de interés es macroscópica es insostenible y en la mayoría de los casos de poca utilidad. Por todo lo anterior, el problema principal es establecer la relación entre las propiedades efectivas y las propiedades de las fases individuales, guiadas por el análisis de las geometrías involucradas en las diferentes escalas.

De manera general, un material compuesto está formado por diferentes dominios cada uno con propiedades diferentes, independientemente de la estructura subyacente. Consideraremos para el diseño de los modelos de material compuesto una familia de medios continuos con estructura periódica. Dicha estructura puede ser caracterizada por un parámetro pequeño $\varepsilon > 0$ (representativo del tamaño de las heterogeneidades). La disposición geométrica propuesta responderá a celdas unitarias anidadas en una microescala y nanoescala, dando lugar a una estructura biperiódica. Este estudio proporcionará la base para desarrollar modelos matemáticos que brinden una descripción del comportamiento macroscópico de medios heterogéneos con estructuras más complejas, donde se manifiesta la presencia de múltiples escalas microestructurales.

2.1.1. Geometría

Vamos a describir con mayor precisión el modelo en este marco. Consideramos un problema de conducción de material compuesto que se supone que tiene una estructura periódica. Para ello se considera un dominio (región abierta y conexa) Ω de \mathbb{R}^n $(n = 1, 2 \circ 3)$ con frontera $\partial\Omega$ suave por tramos. Dicho dominio se extiende sobre la coordenada espacial $x \in \mathbb{R}^n$ (conocida como variable lenta). En este contexto se considerará una estructura que pueda ser caracterizada periódicamente por dos niveles microestructurales. Un primer nivel con período δ y un segundo nivel con período d.

De esta forma, para un medio con longitud característica L podemos considerar los parámetros pequeños:

$$\varepsilon_1 = \frac{\delta}{L}, \qquad \varepsilon_2 = \frac{d}{L},$$

donde $\varepsilon_1 \ll 1$ (el parámetro es pequeño) y $\varepsilon_2 \ll \varepsilon_1$ (existe una clara separación de escala) [47,61]. Por simplicidad, consideraremos $\varepsilon_1 = \varepsilon$ y $\varepsilon_2 = \varepsilon^2$. Este es el caso en que se considera como longitud característica del medio a

$$L = \frac{\delta}{\varepsilon}, \quad \left(\varepsilon = \frac{d}{\delta}\right).$$

Por ejemplo, si $\varepsilon = 10^{-3}$ y la longitud característica está dada en milimetros, entonces, como $\varepsilon_1 = 10^{-3}$ y $\varepsilon_2 = 10^{-6}$, la diferencia de escalas va de milímetros a micras en la primera y



Figura 2-1: Matriz con inclusiones esféricas formando conglomerados, los cuales pueden estar representados mediante fronteras virtuales (izquierda) o mediante partículas de mayor tamaño (derecha).

a nanometros en la segunda. La figura 2-1 muestra dos ejemplos de geometrías derivadas del estudio de nanofluidos.

La existencia de dos escalas periódicas microestructurales está relacionada con la existencia de dos celdas periódicas εY , $\varepsilon^2 Z$ cuya aplicación reiterada cubre el dominio Ω . En la notación anterior:

$$Y = (0, 1)^n, \qquad Z = (0, 1)^n.$$

El objeto que estudiaremos a continuación será un conductor térmico periódico con varias componentes, donde cada una posee un comportamiento conocido (medio multifásico). Esto quiere decir que cada celda $W \in \{Y, Z\}$ está formada por un número finito de subconjuntos no vacíos $\{W^{(i)}\}_i$ con fronteras $\partial W^{(i)}$ suaves por tramos tales que

$$\bigcup_{i} \overline{W^{(i)}} = W. \tag{2-1}$$

Se dice que la frontera es suave (por tramos) si existe una función suave (por tramos) con dominio en $I_n = [0, 1]^{n-1}$ y cuya imagen es dicha frontera [62, 63].

Si bien nuestro desarrollo también es válido para fronteras Lipschitz continuas y un número finito de fases, restringiremos nuestro estudio a medios bifásicos con frontera suave por tramos constituido por una matriz externa y el resto de subdominios los denominaremos inclusiones. Denotaremos por $\tau(\epsilon Q)$ al conjunto formado por la unión de todas las traslaciones de la forma

$$\tau(\epsilon Q) = \{\epsilon(k+q), k \in \mathbb{Z}^n, k = (k_1, \dots, k_n), q \in Q\}.$$

Definiremos

$$\Omega_Y^{(i)} = \Omega \cap \tau(\varepsilon Y^{(i)}), \quad \Omega_Z^{(i)} = \Omega \cap \tau(\varepsilon^2 Z^{(i)}),$$
$$\Gamma_Y^{\varepsilon} = \partial \tau(\varepsilon Y^{(2)}), \quad \Gamma_Z^{\varepsilon} = \partial \tau(\varepsilon^2 Z^{(2)}), \quad \Gamma^{\varepsilon} = \Gamma_Y^{\varepsilon} \cup \Gamma_Z^{\varepsilon}.$$

A cada uno de estos dominios los denominaremos *fases*, y si alguno de ellos es conexo lo llamaremos *matriz*. De esta forma para el caso bifásico, la fase $\Omega^{(2)} = \Omega_Y^{(2)} \cup \Omega_Z^{(2)}$ forma el conjunto de todas las inclusiones y $\Omega^{(1)} = \Omega \setminus \Omega^{(2)}$ es la matriz.

2.1.2. Condiciones de contacto

En la formación de un material compuesto es de esperar que surjan nuevos efectos sobre las interfaces de las componentes, diferentes a las de las fases circundantes e influir en gran medida en las propiedades globales. Estos se deben, por ejemplo, a las interacciones químicas entre constituyentes, efectos térmicos, impurezas, rugosidades, etc. [58,64–66].

Existe entonces una separación natural entre dichos materiales que provoca que las fuerzas que las mantienen juntas, formando el nuevo material, no se distribuyan de manera uniforme durante el proceso de formación. Existen dos vías clásicas para modelar dicho contacto: (1) como si se tratara de una fase intermedia (mesofase) con propiedades propias, o (2) como una superficie donde se refleja la interacción entre fases (con una condición de contacto). La relación entre ambas se abordará posteriormente (Sección 4.4.3).

Lo anterior significa que el contacto entre las fases no es perfecto, surgiendo una barrera que frena, en el caso de la conducción del calor, el flujo de calor a través de la interfaz [67, 68]. En muchas otras aplicaciones la aparición de dicha barrera es también fundamental para comprender el comportamiento efectivo del material compuesto [69,70].

La transferencia de calor sigue en dicha interfaz dos caminos principales. Uno de esos caminos es continuo y se produce a través del contacto que existe entre las constituyentes, dicha transferencia es muy eficiente. Sin embargo, en los intersticios aparecen discontinuidades, ya sea que estén rellenos de otro material más o menos conductivo (usualmente gas) o que se hayan formado vacíos, lo que provoca que la capacidad de transferencia de calor y la radiación sean muy diferentes (fig. 2-2).

Existen varios tipos de contacto imperfecto [71], los dos más comunes son los conocidos como de *tipo resorte o spring* y de *tipo membrana o coherente* [65, 72, 73]. En nuestro caso consideraremos el primero, el cual ha sido ampliamente utilizado en la literatura debido a su importancia [74–77].

Para modelar este efecto se considera una conductancia interfacial h_c [W/m²K] en serie con respecto a los materiales que se encuentran a cada lado de la interfaz. Si ΔT es la diferencia de temperatura por superficie de contacto y A es dicha superficie, entonces $Q = A h_c \Delta T$. De aquí que para una resistencia de contacto $R = \frac{1}{h_c A}$ [K/W], resulta

$$Q = \frac{\Delta T}{R}.$$

Asumiremos que la resistencia R = R(x) no es espacialmente uniforme, pero está acotada $0 < R(x) < \infty \ \forall x \in \Gamma$ [67].



Figura 2-2: Gradiente de temperatura en una vecindad de la interfaz (escala espacial aumentada).

Consideraremos que las longitudes características de las componentes microestructurales son pequeñas en comparación con la longitud característica del medio (i.e. $\varepsilon = \frac{l}{L} \ll 1$). Introduciremos un parámetro relevante que nos permite caracterizar nuestro problema de una mejor manera, el llamado número de Biot [72, 78, 79]:

$$\mathcal{B} = \frac{\left|h_{c}\left[\!\left[u^{\varepsilon}\right]\!\right]_{\Gamma}\right|}{\left|a_{kl}^{(1)}\frac{\partial u^{(1)}}{\partial X_{l}}n_{k}^{(1)}\right|} = \frac{h_{c}L}{\left|a\right|}$$

Este valor es adimensional y mide la razón entre conductividad de la barrera térmica en la interfaz con respecto a la conductividad de los componentes. Los casos de interés son del tipo

$$\mathcal{B} = O(\varepsilon^p), p = -1, 0, 1, 2, 3,$$

y representan modelos de estudio que están directamente relacionados con los diferentes tipos de contacto [67,71,78,80,81].

Para todos los modelos cuando $\varepsilon \to 0$, se tiene el límite

$$h_c(\varepsilon) \to \infty \Leftrightarrow \llbracket u^{\varepsilon} \rrbracket \Big|_{\Gamma} \to 0,$$

lo que indica la presencia de un contacto perfecto. Analizaremos para nuestro estudio el segundo,

es decir, el caso en que no hay dependencia del parámetro pequeño

$$\mathcal{B} = O(1), \tag{2-2}$$

puesto que es el modelo correspondiente a un contacto imperfecto de tipo resorte [71, 78, 80].

2.2. Formulación analítica (fuerte)

El problema que se pretende estudiar está representado por una familia de ecuaciones diferenciales elípticas con coeficientes periódicos y rápidamente oscilantes dependientes de dos variables rápidas [4]. Consideraremos el modelo matemático de la conducción de calor. Para el interior del dominio asumiremos la ecuación del calor y se considera que el flujo de calor a través de la frontera es proporcional a la diferencia entre la temperatura de la superficie (T) y la temperatura ambiente (T_0) :

$$K\nabla T \cdot n = -\lambda(T - T_0)$$
 sobre $\partial\Omega$,

donde la conductancia $\lambda = \lambda(x, T) [W/(m^2 K)]$ es un coeficiente que caracteriza la transferencia de calor. En la frontera exterior es usual considerar el caso límite, cuando $\lambda \to \infty$, obteniéndose

$$T = T_0, \quad \text{sobre } \partial\Omega, \tag{2-3}$$

la cual se conoce como *condición de contorno de Dirichlet*. Esto significa que el cuerpo está en contacto térmico perfecto con el entorno, es decir, el calor fluye libremente a través de la superficie de modo que las temperaturas del cuerpo y ambiente son iguales sobre esta.

Asumiendo condiciones de Dirichlet (2-3) en la frontera del cuerpo, las ecuaciones relevantes del modelo matemático son las siguientes [58, 78]:

$-\nabla \cdot (K^{\varepsilon} \nabla T^{\varepsilon}) = \dot{g}$	en Ω ,
$K^{\varepsilon} \nabla T^{\varepsilon} \cdot n = -h_c \llbracket T^{\varepsilon} \rrbracket$	sobre Γ^{ε} ,
$\llbracket K^{\varepsilon} \nabla u^{\varepsilon} \rrbracket \cdot n = 0$	sobre Γ^{ε} ,
$T^{\varepsilon} = T_0$	sobre $\partial \Omega$.

Para escribir las ecuaciones anteriores en forma adimensional se eligen constantes de referencia de la manera que se describe a continuación: Tomamos

$$u = \frac{T - T_0}{T_c}, \qquad X = xL,$$

para una cierta temperatura de referencia, T_c , del mismo orden que la temperatura media estimada y usando una longitud característica del medio, L. Suponiendo que las conductividades de los medios que conforman al material son del mismo orden de magnitud, se escoge una conductividad de referencia (k_c) de dicho orden:

$$K = (k_{ij}) = (a_{ij})k_c = Ak_c.$$

Además, utilizaremos la misma conductividad de referencia para obtener la conductancia inter-

facial y la potencia del calor:

$$h_c = B \frac{k_c}{L}, \quad \dot{g} = f \frac{k_c T_c}{L}.$$

De esta manera se obtiene el problema adimensional: Encontrar $u^{\varepsilon}: \Omega \subset \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}, u^{\varepsilon} \in C^2(\Omega \setminus \Gamma^{\varepsilon}) \cap C(\Omega \setminus \Gamma^{\varepsilon}), que satisface$

$$L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} \equiv -\nabla \cdot (A^{\varepsilon}\nabla u^{\varepsilon}) = f \qquad \text{en } \Omega, \qquad (2-4)$$

$$A^{\varepsilon} \nabla u^{\varepsilon} \cdot n = -B^{\varepsilon} \llbracket u^{\varepsilon} \rrbracket \qquad \text{sobre } \Gamma^{\varepsilon} = \Gamma^{\varepsilon}_Y \cup \Gamma^{\varepsilon}_Z, \qquad (2-5)$$

$$\llbracket A^{\varepsilon} \nabla u^{\varepsilon} \cdot n \rrbracket = 0 \qquad \text{sobre } \Gamma^{\varepsilon} = \Gamma_Y^{\varepsilon} \cup \Gamma_Z^{\varepsilon}, \qquad (2-6)$$

$$u^{\varepsilon} = 0$$
 sobre $\partial\Omega$. (2-7)

Donde $A^{\varepsilon} = (a_{ij}^{\varepsilon})$ y f son la conductividad térmica y la potencia calorífica normalizadas, respectivamente. En estas ecuaciones x representa la variable espacial a escala global y B^{ε} es el ya mencionado número de Biot, el cual posee órdenes diferentes dependiendo de si x se encuentra sobre Γ_Y^{ε} o sobre Γ_Z^{ε} . El número de Biot sobre las superficies de contacto, se define por:

$$B^{\varepsilon} = \begin{cases} B_1 \varepsilon^{-1}, \text{ sobre } \Gamma_Y^{\varepsilon} \\ B_2 \varepsilon^{-2}, \text{ sobre } \Gamma_Z^{\varepsilon} \end{cases}$$

donde $B_{\alpha} = O(1)$ ($\alpha = 1, 2$), para que se satisfaga la condición (2-2) en cada escala.

El caso $B_{\alpha} = \infty$ se corresponde con los casos de contacto perfecto, donde (2-5) se convierte en $\llbracket u^{\varepsilon} \rrbracket = 0$. El caso $B_{\alpha} = 0$ se corresponde con una superficie perfectamente aislante, donde no es posible el intercambio de calor entre los medios y hay desacoplamiento, a esto se le conoce como condición de frontera *adiabática* [82].

2.2.1. Método de Homogeneización

En nuestro caso consideremos una sucesión de operadores diferenciales $\{L_k\}_k$ (no necesariamente lineales), para los cuales nos interesa conocer el comportamiento asintótico de las soluciones u_k de los problemas

$$L_k u_k = f,$$

cuando $k \to \infty$, conociendo que los coeficientes que componen a L_k son rápidamente oscilantes. Consideraremos $k = \varepsilon^{-1}$ y un operador elíptico de la forma

$$L_k(\cdot) = -\nabla \cdot \left(A\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{x}{\varepsilon^2}\right) \nabla(\cdot) \right), \qquad A \text{ biperiódica,}$$

pero en general pudieran ser de interés otro tipo de oscilaciones (cuasiperiodicidad, medios aleatorios, etc.) [83]. A es conocido como *tensor de propiedades* del medio.

El enfoque de la homogeneización es encontrar un operador \mathcal{L} tal que $u_k \to u$ siendo u la solución de una ecuación límite

$$Lu = f.$$

Dicho operador se dice *homogeneizado* y a este proceso se le conoce como *proceso de homogeneización*, pues se ha transformado una familia de problemas (con coeficientes rápidamente oscilantes) sobre un medio heterogéneo en un problema (con coeficientes constantes) sobre un medio homogéneo. A la matriz \hat{A} tal que

$$L(\cdot) = -\nabla \cdot \left(\hat{A}\nabla(\cdot)\right),$$

se le llama tensor de propiedades efectivas (sus elementos son los coeficientes efectivos) y puede interpretarse como las propiedades macroscópicas del medio conductivo que ocupa la región Ω . Basado en diferentes métodos es siempre posible encontrar, matemáticamente, las propiedades efectivas para este tipo de problemas, aunque no necesariamente la propiedad efectiva propuesta respeta el comportamiento macroscópico esperado [3,7,84]. Es por esto que esta interpretación es conocida como Hipótesis o Principio de Homogeneidad Equivalente [3,7,85] y es la base de la mayoría de las aplicaciones físicas de la homogeneización. La figura 2-3 muestra las etapas del proceso de homogeneización así como algunas de las técnicas más empleadas durante dicho proceso.



Figura 2-3: Esquema de funcionamiento y etapas de la homogeneización.

Si bien la idea de encontrar un material homogéneo equivalente fue introducido a principios de 1970 [43–46] para problemas específicos, varios métodos se han desarrollado posteriormente, y la *Homogeneización* se ha convertido en toda una rama de la Matemática [10, 86]. Existen tres temáticas claramente distinguibles:

- La más general es la de la convergencia funcional, que pone pocas o ninguna restricción en el tamaño o la disposición de las heterogeneidades [87–93].
- La segunda, se ocupa de modelos probabilísticos y estocásticos [83,94–97], donde el foco central se encuentra en la distribución aleatoria de las heterogeneidades.
- La tercera, dedicada a las estructuras periódicas y cuasiperiódicas, la cual fue la primera en desarrollarse y es la escogida para realizar nuestra investigación.

Aunque este último enfoque es ciertamente el menos general, ya que la periodicidad es una suposición muy fuerte y difícil de garantizar [47], ha adquirido una gran importancia pues permite manejar modelos altamente complejos [98, 99]. Su método fundamental se basa en la expansión asintótica en múltiples escalas combinada con métodos de promedios, establecido por los ingenieros y mecánicos [100–102] y formalizado sistemáticamente para manejar homogeneización de problemas de contorno con coeficientes periódicos rápidamente oscilantes [3, 4, 103]. Este enfoque se ha dado a conocer como *Método de Homogeneización Asintótica* (M.H.A.), y es la base de la presente investigación.

Observación: Se debe tener en cuenta que se trata de un procedimiento formal y es necesario utilizar otras técnicas para justificar los resultados de homogeneización obtenidos por este método. Este último paso se puede realizar mediante métodos de convergencia funcional, utilizando funciones de prueba oscilantes, entre otros. En nuestro caso justificaremos la solución mediante un principio del máximo generalizado (Capítulo 3).

Por último, pero no menos importante, la utilidad del M.H.A. va mucho más allá de los materiales periódicos, ya que se ha demostrado ser aplicables en el estudio de casos más generales [47, 104, 105]. Es por eso que sin lugar a dudas, es el más popular de los enfoques y existe una cantidad considerable de literatura asociada [3, 4, 10, 90].

2.3. Formulación variacional (débil)

La formulación variacional de un problema de ecuaciones diferenciales es una forma de representar dichas ecuaciones mediante integrales. Para ello se encuentra una formulación equivalente del problema utilizando operadores funcionales entre espacios de funciones más genera-les [106,107]. De hecho, a menudo es más fácil determinar una solución a partir de la formulación variacional, llegando a encontrar soluciones a problemas sin solución en el sentido clásico, debido a las restricciones propias del problema original. Conceptos como convergencia y diferenciabilidad son debilitados para agrupar un espacio de soluciones más amplio y las propiedades de los operadores funcionales ganan más relevancia. Esta teoría está emparentada con la optimización matemática dando lugar al campo de estudio conocido como análisis o cálculo de variaciones.

El objetivo de esta sección es proporcionar una referencia rápida de los resultado sobre ciertos espacios de Banach especiales, conocidos como espacios de Sobolev, y su uso en la formulación variacional de los problemas de ecuaciones diferenciales que aparecen a lo largo de este trabajo. Los conceptos aquí presentados también serán de utilidad para el desarrollo de las teorías presentadas en el Capítulo 3.

2.3.1. Algunas notas sobre espacios de Sobolev

Los espacios de Sobolev son espacios de funciones débilmente diferenciables que surgen de manera natural en numerosos problemas en la teoría de ecuaciones diferenciales parciales, teoría de aproximación, análisis de Fourier y otras áreas de la matemática pura y aplicada [108,109].

Consideremos $C_0^{\infty}(\Omega)$ el conjunto de funciones con soporte compacto en Ω . Una función vectorial $v = (v_1, \dots, v_n) \in \mathcal{L}^1(\Omega^n)$ se dice que es gradiente de $u \in \mathcal{L}^1(\Omega)$, si

$$\int_{\Omega} u \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} dx = -\int_{\Omega} v_i \varphi dx, \quad \forall \varphi \in C_0^{\infty}(\Omega).$$

A la función gradiente se le denota ∇u .

Sean $B_1 \subset B_2$ espacios de Banach, se dice que B_1 está completamente inmerso en B_2 si existe una constante C tal que $||x||_Y \leq C ||x||_X \forall x \in X$, y toda sucesión acotada en X es precompacta en Y (i.e. se pueden extraer subsucesiones convergentes en Y).

El espacio de Sobolev $W_2^1 = W_2^1(\Omega)$ está formado por las funciones de $\mathcal{L}^2(\Omega)$ cuyo gradiente está en $\mathcal{L}^2(\Omega^n)$, es decir

$$W_2^1(Q) = \{ u \in \mathcal{L}^2(Q) : \frac{\partial u}{\partial \xi_k} \in \mathcal{L}^2(Q), k = 1, \dots, n \}.$$

 W_2^1 , provisto del producto escalar

$$[u_1, u_2] = \int_Q u_1 u_2 dx + \int_Q \frac{\partial u_1}{\partial x_i} \frac{\partial u_2}{\partial x_i} dx,$$

es un espacio de Hilbert [110] que denotaremos por H^1 , y la norma correspondiente es

$$\|u\|_{W_{2}^{1}}^{2} = \|u\|_{\mathcal{L}^{2}}^{2} + \|\nabla u\|_{\mathcal{L}^{2}}^{2}$$
$$= \|u\|_{\mathcal{L}^{2}}^{2} + \int_{Q} \left(\sum_{k=1}^{n} |\frac{\partial u}{\partial x_{k}}|^{2}\right) dx$$

De esta forma se tiene que $u_1 = u_2$ en H^1 , si y solo si, $[u_1, v] = [u_2, v] \quad \forall v \in H^1$.

Se define la diferenciabilidad de orden $\alpha = (\alpha_1, \ldots, \alpha_k)$, denotada por

$$D^{\alpha}u \in H$$
, siendo $|\alpha| = \sum \alpha_i = m$

si su gradiente existe en el mismo espacio $(\exists v = \nabla u \in H)$ y sus componentes (v_i) satisfacen

$$D^a v_i \in H$$
, para $|a| \leq m - 1$,

es decir, que las componentes del gradiente sean diferenciables de un orden menor. Se considera $D^1 v \in H$ equivale a $\nabla v \in H$. En particular, en el caso de existir las derivadas parciales usuales, las funciones:

$$\frac{\partial^{|\beta|} u}{\partial x_1^{\beta_1} \dots \partial x_n^{\beta_n}}$$

están en H siempre que $|\beta| \leq |\alpha|$.

Los espacios de Sobolev se definen de manera general como:

$$W_p^m(Q) = \{ u \in \mathcal{L}^p(Q) : D^\alpha u \in \mathcal{L}^p(Q); |\alpha| \le m \}.$$

En la literatura es común denotar por $H^m = W_2^m$ pues pueden ser dotados con estructura de espacios de Hilbert, siendo común también denotar por $H^0 = \mathcal{L}^2$ [106].

Asociado a H^1 es muy frecuente el uso del espacio que denotaremos por $H_0^1 = H_0^1(Q)$ [111], que no es más que la clausura de C_0^{∞} en W_2^1 . En otras palabras, $u \in H_0^1$, si y solo si, existe una sucesión $\{u_k\} \subset C_0^{\infty}$ tal que $u_k \to_{k\to\infty} u$ en la norma de W_2^1 . Estos espacios aparecen naturalmente en la solución del problema de Dirichlet, ya que $u \in H_0^1(Q)$ es equivalente a la condición de frontera $u|_{\partial Q} = 0$ y se cumple que la inmersión $H_0^1 \subset \mathcal{L}^2$ es compacta. La seminorma

$$||u||_W \equiv ||\nabla u||_{\mathcal{L}^2}$$

puede ser tomada como norma equivalente en el espacio $H_0^1(Q)$ [107]. En efecto, para un dominio acotado Q, la desigualdad de Friedrichs:

$$\|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \le c_0 \|\nabla u\|_{\mathcal{L}^2}^2$$

es cierta para una constante c_0 independiente de u, lo cual implica que

$$\|\nabla u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \le \|u\|_{\mathcal{L}^2}^2 + \|\nabla u\|_{\mathcal{L}^2}^2 \le (1+c_0)\|\nabla u\|_{\mathcal{L}^2}^2,$$

y por lo tanto ambas son equivalentes.

A las funciones definidas en la frontera a partir de otra definidas en la clausura del dominio se les conoce como *trazas*

$$tr(u) = u\Big|_{\partial Q}.$$

Si para un dominio acotado Q su frontera ∂Q es diferenciable (o diferenciable por partes), entonces, toda función de $u \in H^1(Q)$ posee una traza $tr(u) \in \mathcal{L}^2(\partial Q)$ [111]. Este resultado garantiza la existencia de las trazas al menos para todas las funciones que se van a considerar en este trabajo.

Al espacio dual (el conjunto de los funcionales lineales) de H^1 se suele denotar por $H^{-1} = H^{-1}(Q)$. Un ejemplo de funcional lineal es

$$[f_0, \varphi] = \int\limits_Q f_0 \varphi dx, \quad f_0 \in \mathcal{L}^2.$$

Esta fórmula define una inmersión del conjunto \mathcal{L}^2 en H^{-1} . Este operador es además compacto [106].

Para cualquier campo vectorial $p \in \mathcal{L}^2(Q^n)$ la divergencia es un elemento de H^{-1} , y puede definirse a partir de la fórmula

$$[\nabla \cdot p, \varphi] = -\int_{Q} p \cdot \nabla \varphi dx, \quad \forall \varphi \in H^{1}_{0},$$

donde " \cdot " denota el producto escalar de dos vectores. Esto generaliza la definición de divergencia clásica. El estimado siguiente es válido:

$$\|p\|_{H^{-1}(Q)} = \sup_{\|\varphi\|_1 = 1} \int_{Q} p \cdot \nabla \varphi dx \le \|p\|_{\mathcal{L}^2}^2.$$

En un dominio con frontera Lipschitz continua se cumple la desigualdad de Poincaré:

$$\int_{Q} u^{2} \leq c_{0} \left\{ \left(\int_{Q} u \right)^{2} + \int_{Q} |\nabla u|^{2} \right\}, \quad \forall u \in H^{1},$$

y la inmersión de H^1 en \mathcal{L}^2 es compacta.

Para nuestro trabajo nos interesa resolver ecuaciones diferenciales, pero en lugar de utilizar el espacio original encontraremos soluciones generalizadas, definidas en un espacio de Sobolev acorde al problema en cuestión. Para celdas periódicas nos interesa conocer la solución en cada subdominio, esto quiere decir que en lugar de buscar soluciones en H^1 buscaremos en espacios de la forma

 $\mathcal{H}^1(Q) = \left\{ u : u \in H^1(Q), \text{ tal que su traza es única} \right\}.$

En particular, para celdas periódicas tales como las definidas en 2-1

$$\mathcal{H}^{1}(W \setminus \Gamma) = \left\{ u : u \Big|_{W_{i}} \in H^{1}(W_{i}), \forall i, \text{ tal que su traza es única} \right\}.$$

2.3.2. Planteamiento del problema variacional

El problema de contorno descrito y otros que derivaremos posteriormente de este son, en general, muy difíciles de resolver directamente. Para resolver este problema se pueden utilizar diferentes métodos, entre los que destacan los métodos variacionales (numéricos y analíticos), ya que en múltiples ocasiones es más conveniente trabajar con el problema en su forma débil equivalente.

La formulación variacional de una ecuación diferencial parcial es una forma de escribirla en términos de un problema integral en un espacio de soluciones que debilita las exigencias de diferenciabilidad de las soluciones. Nosotros estamos especialmente interesados en aplicar el Método de los Elementos Finitos. Es por esto que obtendremos una formulación variacional del problema de contorno que nos permita resolverlo en espacios de funciones de dimensión finita.

Este punto de vista no solo permite encontrar soluciones analíticas y numéricas aproximadas [58, 78, 112], sino que permite obtener cotas para las magnitudes y expresiones importantes relacionadas con dicha solución [82, 113, 114].

En lugar de considerar (2-4)-(2-7) directamente tomemos un sistema de la forma

$$L^* u \equiv -\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}(\nabla u + \mathbf{h})) = g$$
 en $\Omega \backslash \Gamma$, (2-8)

$$\boldsymbol{\sigma}(\nabla u + \mathbf{h}) \cdot \eta = -\beta \, [\![u]\!] \qquad \text{sobre } \Gamma, \qquad (2-9)$$
$$[\![\boldsymbol{\sigma}(\nabla u + \mathbf{h}) \cdot \eta]\!] = 0 \qquad \text{sobre } \Gamma. \qquad (2-10)$$

$$\nabla (\nabla u + \mathbf{h}) \cdot \eta = 0 \qquad \text{sobre 1}, \qquad (2-10)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\nabla u + \mathbf{n}) \cdot \boldsymbol{\eta} = \mathbf{u}^{-1} \qquad \text{sobre } \partial N, \qquad (2-11)$$

$$u = \mathbf{u}^{\mathbf{0}}$$
 sobre ∂D , (2-12)

donde

$$\partial \Omega = \partial D \cup \partial N,$$

$$\partial D \cap \partial N = \emptyset,$$
(2-13)

 σ es un tensor periódico y η representa el vector normal unitario de Γ. Si bien la función vectorial **h** pudiera incorporarse a g como

$$g^* = g + \nabla \cdot \mathbf{G} = g + \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{h})$$

preferimos mantener esta notación por comodidad (en la Sec. 5.3 retomaremos este aspecto).

Sea $v \in \mathcal{H}^1(\Omega)$ función de prueba, se obtiene la siguiente formulación:

encontrar $u \in \mathcal{H}^1(\Omega)$ tal que

$$A_{\beta}(u,v) = b(v) \tag{2-14}$$

donde

$$\begin{aligned} A_{\beta}(u,v) &= \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \nabla u \cdot \nabla v dV + \oint_{\Gamma} \beta \, \llbracket u \rrbracket \llbracket v \rrbracket dS, \\ b(v) &= -\int_{\Omega} gv dV - \int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{h} \cdot \nabla v dV - \oint_{\partial N} \mathbf{u}^{1} v dS - \oint_{\partial D} (\boldsymbol{\sigma} (\nabla \mathbf{u}^{0} + \mathbf{h}) \cdot \eta) v dS. \end{aligned}$$

Observación: Estos operadores satisfacen las condiciones de los Teoremas 2 y 3, que garantizan existencia y unicidad de solución [80, 89, 115, 116] (Capítulo 3).

Para el desarrollo de nuestro trabajo es también de interés el estudio de problemas con condiciones de periodicidad. En tales casos, $\partial N = \emptyset$ y la condición de frontera (2-12), puede ser reemplazada por condiciones de periodicidad, i.e. $u \in H^1_{\sharp}$ donde

$$H^1_{\sharp} = \{ v \in H^1, \Omega - \text{periódica} \}.$$

Es suficiente entonces restringir el espacio de las funciones de prueba Ω -periódicas, $v \in H^1_{\sharp}$, para garantizar la existencia de solución del problema.

En particular para $\Omega = W$, $\partial N = \emptyset$ y $\mathbf{u}^{\mathbf{0}}$ periódica en su frontera, considerando funciones de prueba, $v \in H^1_{\sharp}$, el último sumando de b(v) en (2-14) se reduce a

$$\int_{\partial D} (\boldsymbol{\sigma} (\nabla \mathbf{u^0} + \mathbf{h}) \cdot \eta) v dS = \int_{\partial D} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{h} \cdot \eta) v dS.$$

Puesto que el vector normal toma valores opuestos en signo en caras opuestas de $\Omega = W$. Otro caso de interés es cuando **h** es periódica, en el cual para v periódica se anula el sumando

$$\int_{\partial D} (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\eta}) v dS = 0.$$

Es decir, teniendo todo esto en cuenta, la formulación variacional toma la forma particular

$$\int_{\Omega} \boldsymbol{\sigma} (\nabla u + \mathbf{h}) \cdot \nabla v dV + \oint_{\Gamma} \beta \llbracket u \rrbracket \llbracket v \rrbracket dS = -\int_{\Omega} g v dV$$
(2-15)

De lo visto con anterioridad, para (2-4)-(2-7), el problema en su forma débil se obtiene tomando

$$\boldsymbol{\sigma} = A^{\varepsilon}, \mathbf{h} \equiv 0, g = f, \beta = B^{\varepsilon}, \mathbf{u}^{\mathbf{0}} \equiv 0.$$

No obstante nos interesa obtener también formulaciones débiles de los problemas que se derivan de este utilizando el método de homogeneización asintótica. Esto nos permitirá caracterizarlos y obtener justificaciones rigurosas para la existencia, unicidad y aproximación respecto a las soluciones del problema original, como se verá en el siguiente capítulo.

Capítulo 3

Fundamentación matemática

Este capítulo está dedicado a las herramientas de análisis funcional necesarias para justificar las diferentes formulaciones (fuertes y débiles) presentadas para ecuaciones diferenciales, así como establecer las condiciones bajo las cuales estas tienen soluciones que satisfacen los requerimientos de los métodos propuestos.

Para ello presentaremos algunos elementos básicos del análisis variacional. Luego se justificará la existencia y unicidad de las soluciones de los problemas locales, así como los elementos imprescindibles del análisis asintótico. Si bien estos son los elementos básicos del Método de Homogeneización Asintótica, veremos cómo utilizar las mismas bases para una justificación del Método de los Elementos Finitos. Nuestra intención no es realizar un análisis exhaustivo de todos los resultados, sino presentar algunos de los que consideramos fundamentales para las diferentes teorías involucradas.

3.1. Principios variacionales

Lema 1 (desigualdad de Cauchy-Bunyakovsky-Schwarz). Sea V un espacio vectorial real con producto escalar, entonces

$$|[u,v]|^2 \le [u,u][v,v] \qquad \forall u,v \in V;$$

y esta desigualdad es estricta cuando u y v son linealmente independientes.

De manera general, el Teorema de Lax-Milgram garantiza la existencia y unicidad de la solución de problemas de contorno que involucran ecuaciones en derivadas parciales elípticas, debido a la equivalencia con las formulaciones integrales [89,115,116].

Aún más, los operadores discretos que derivan de FEM son restricciones de operadores diferenciales débiles que se basan en los mismos principios, solo que en dimensión finita [117,118]. Por otra parte los resultados derivados de Lax-Milgram se basan en gran medida en el Teorema de representación de Riesz, por lo cual a continuación veremos ambos teoremas.

Teorema 2 (representación de Riesz). Sea H un espacio de Hilbert real y H' su dual, la aplicación $\Phi: H \to H'$ definida por

$$\Phi(u) = \phi_u, \text{ donde } \phi_u(v) = [u, v],$$
es un isomorfismo isométrico (lineal, biyectiva y $||u||_H = ||\Phi(u)||_{H'}$).

Teorema 3 (de Lax-Milgram). Sea a(u, v) una forma bilineal, continua y coerciva en un espacio de Hilbert H. Entonces, para toda aplicación lineal $\varphi \in H'$ existe un único $u_{\varphi} \in H'$ tal que

$$a(u_{\varphi}, v) = \varphi(v), \quad \forall v \in H.$$

Además, existe una constante c > 0 que no depende de u_{φ} tal que

$$\|u_{\varphi}\|_{H} \le c \|\varphi\|_{H'}$$

Corolario 4. Además, si a(u, v) es simétrica, entonces u_{φ} se caracteriza por ser la solución del problema de optimización:

$$u\in H, \ tal \ que: \quad \frac{1}{2}a(u,u) = \min_{v\in H} \left\{ \frac{1}{2}a(v,v) - \varphi(v) \right\}.$$

Lema 5 (designaldad de Poincaré-Wirtinger). Sean Ω un dominio acotado con frontera Lipschitz, y $1 \leq p < \infty$. Entonces, para toda función u en el espacio de Sóbolev $W_p^1(\Omega)$:

$$\|u - \langle u \rangle_{\Omega}\|_{L^p(\Omega)} \le C \|\nabla u\|_{L^p(\Omega)}.$$

Donde $\langle \cdot \rangle_{\Omega}$ es el operador de promediación y C es una constante que solo depende del domino $C = C(\Omega)$.

En particular, si u se anula sobre la frontera $(u\Big|_{\partial\Omega} = 0)$ se obtiene la denominada **de**sigualdad de Poincaré:

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} \le C \|\nabla u\|_{L^p(\Omega)}.$$

La generalización de este resultado para otros espacios de Sóbolev es conocida como desigualdad de Friedrich para funciones de *soporte compacto* (i.e., el conjunto donde no se anulan es cerrado y acotado).

Lema 6 (desigualdad de Friedrich). Sean Ω un dominio acotado con diámetro ℓ y $1 \leq p < \infty$. Entonces para toda función u en el espacio de Sóbolev $W_p^m(\Omega)$ con soporte compacto, se cumple que

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} \le \ell^k \left(\sum_{|\alpha|=k} \|D^{\alpha}u\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{1/p}$$

Mostraremos a continuación un teorema que resulta fundamental para la justificación matemática de nuestros problemas.

Teorema 7 (Principio del máximo generalizado). El problema (2-14) tiene tiene una única solución generalizada en el espacio $\mathcal{H}^1(\Omega \setminus \Gamma)$, y satisface

$$||u||_{W_2^1} \le c ||g||_{L_2}.$$

Utilizaremos este teorema general de manera similar a como ha sido empleado el principio del máximo en la literatura [80,116] para otros problemas de tipo elíptico. Si bien este planteamiento se debe a [3], la demostración del mismo se basa en el teorema de Fredholm [111].

3.2. Lemas de Existencia y Unicidad

Sean las funciones matriciales de $M \times M$ simétricas en el sentido

$$A_{ij}(y) = A_{ji}^{\top}(y) \quad (i, j = 1, ..., N),$$
(3-1)

y sean las funciones vectoriales M-dimensionales

$$f_k(y) \quad (k = 0, 1, ..., N)$$

Supongamos que son acotadas, medibles y Q-periódicas en $y \in \mathbb{R}^N$. Estamos interesados en estudiar el sistema de ecuaciones

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(A_{ij}(y) \frac{\partial u}{\partial y_j}(y) \right) = f_0(y) + \frac{\partial}{\partial y_k} f_k(y). \tag{3-2}$$

A continuación presentaremos varios resultados asociados a la existencia y unicidad de estos problemas. Estos han sido derivados directamente del suplemento de [3].

Observación: Para el presente trabajo se necesita solamente M = 1, donde se reduce a la simetría usual de matrices. A esta condición (3-1) de simetría tan particular para M > 1 también se le conoce como condición de compatibilidad [3,119]. Vista la función matricial matriz como un tensor de cuarto orden $(A_{ij} = (a_{ijkl}))$ la condición es equivalente a:

$$a_{ijkl} = a_{jilk}$$

Si las A_{ij}, f_k son funciones suaves, entonces por una solución 1-periódica de (3-2) queremos decir una función vectorial 1-periódica que satisfacen (3-2) en cada punto $y \in \mathbb{R}^N$.

Sea la celda periódica $Q = [0, 1]^N$, multiplicando por cualquier función vectorial 1-periódica suave φ e integrando en el dominio se obtiene la identidad integral:

$$-\int_{Q} \left[A_{ij} \frac{\partial u}{\partial y_j}, \frac{\partial \varphi}{\partial y_i} \right] dV = \int_{Q} \left[f_0, \varphi \right] dV - \int_{Q} \left[f_k, \frac{\partial \varphi}{\partial y_k} \right] dV, \tag{3-3}$$

donde [a, b] denota el producto escalar de vectores en \mathbb{R}^N . Esta identidad integral permitiría definir las soluciones generalizadas en el caso de los coeficientes que no sean suaves.

Consideremos el espacio se Sóbolev

$$W_2^1(Q) = \left\{ u \in \mathcal{L}^2(Q) : \frac{\partial u}{\partial \xi_k} \in \mathcal{L}^2(Q), k = 1, \dots, n \right\}$$

Llamaremos solución 1-periódica generalizada de la ecuación (3-2) a aquella función $u \in W_2^1(Q)$ que satisfaga (3-3) para toda función de prueba $\varphi \in W_2^1(Q)$.

Observación: Todo lo anterior, y los desarrollos posteriores no pierden generalidad si en lugar de $[0,1]^N$ se hubiera considerado Q-periodicidad para $Q = \prod_{i=1}^N Y_i \subset \mathbb{R}^N$ como multiplicación de intervalos reales $Y_i = [a_i, b_i] \subset \mathbb{R}$.

Diremos que una matriz $A = (a_{ij})$ es coercitiva o definida positiva cuando exista una cons-

tante positiva C > 0 tal que

$$\forall \xi \in \mathbb{R}^n : a_{ij}\xi_i\xi_j \ge C \|\xi\|_2^2$$

A este carácter definido positivo se le conoce como propiedad de *coercitividad* o *elipticidad* [62].

Lema 8. Si las funciones matriciales $A_{ij}(y)$ satisfacen

$$\left\langle \left[A_{ij}(y) \frac{\partial \phi}{\partial y_j}, \frac{\partial \phi}{\partial y_i} \right] \right\rangle_Q \geqslant C \left\langle \left[\frac{\partial \phi}{\partial y_i}, \frac{\partial \phi}{\partial y_i} \right] \right\rangle_Q, \quad C > 0$$
(3-4)

para todo $\phi \in W_2^1(Q)$, entonces (3-2) tiene solución 1-periódica generalizada si y solo si

$$\langle f_0 \rangle = 0. \tag{3-5}$$

Además, esta función es única salvo una constante aditiva, es decir,

$$u(y) = u_0(y) + c,$$

para $u_0(y)$ alguna solución 1-periódica de (3-2). Por comodidad se suele tomar u_0 tal que $\langle u_0 \rangle_Q = 0$.

Observación: La condición (3-4) es más general que la elipticidad, pero en principio bastaría exigir esta última para nuestros problemas.

Demostración: Necesidad (a). Supongamos que conocemos una solución 1-periódica u del problema (3-3). Entonces, seleccionando las funciones de prueba

$$\varphi_r(y) = (\delta_{1r}, \dots, \delta_{nr})^\top, \quad (r = 1, \dots, n),$$

se obtiene que la componente r-ésima de $\langle f_0 \rangle$ se anula, es decir que dicho promedio es necesariamente igual al vector nulo.

Demostración: Suficiencia (b). Denotemos por $\hat{H}(Q)$ al subespacio de $L^2(Q)$ con media cero:

$$\widehat{H}(Q) = \{ u \in \mathcal{L}^2(Q) : \langle u \rangle_Q = 0 \}.$$

Dividiremos esta demostración en dos etapas: (b1) Primeramente demostraremos que existe una única $u \in \hat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$ que satisface la ecuación (3-3) para cualquier $\varphi \in \hat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$. (b2) Finalmente extenderemos este resultado a $\varphi \in W_2^1(Q)$ cuando $\langle f_0 \rangle_Q = 0$.

(b1) Utilizando la desigualdad de Poincaré [111] se tiene que

$$\forall \phi \in W_2^1(Q) : \|\phi\|_{L^2(\Omega)}^2 \le \langle \phi \rangle^2 + \frac{N}{2} \left\langle \left[\frac{\partial \phi}{\partial y_k}, \frac{\partial \phi}{\partial y_k} \right] \right\rangle_Q,$$

y en particular, para $u \in \widehat{H} \cap W_2^1(Q)$:

$$\|u\|_{L^{2}}^{2} \leq \frac{N}{2} \sum_{k=1}^{N} \left\| \frac{\partial u}{\partial y_{k}} \right\|_{L^{2}}^{2}.$$
(3-6)

Pero como por hipótesis se cumple (3-4), esto demuestra la elipticidad del operador bilineal

$$A(u,\varphi) \equiv [u,\varphi]_A \equiv \left\langle \left[A_{ij} \frac{\partial u}{\partial \xi_j}, \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_i} \right] \right\rangle_Q,$$

y por la simetría y acotación de A, dicho operador se convierte en un producto escalar sobre el espacio $\hat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$. Notemos además que la norma $||v||_A = \sqrt{A(v,v)}$ es equivalente a la norma de $W_2^1(Q)$.

Observación: Aquí la simetría en el sentido de (3-1) es necesaria para la simetría del producto $[u, \varphi]_A$, ya que

$$\left[A_{ij}\frac{\partial u}{\partial \xi_j},\frac{\partial \varphi}{\partial \xi_i}\right] =_{def^{\top}} \left[A_{ij}^{\top}\frac{\partial \varphi}{\partial \xi_i},\frac{\partial u}{\partial \xi_j}\right] =_{(3-1)} \left[A_{ji}\frac{\partial \varphi}{\partial \xi_i},\frac{\partial u}{\partial \xi_j}\right] = \left[A_{ij}\frac{\partial \varphi}{\partial \xi_j},\frac{\partial u}{\partial \xi_i}\right].$$

Si reescribimos (3-3) como

$$[u,\varphi]_A = -\langle [f_0,\varphi] \rangle_Q + \sum_{k=1}^n \left\langle \left[f_k, \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_j} \right] \right\rangle_Q \equiv b(\varphi), \tag{3-7}$$

el miembro derecho es un funcional lineal para φ en $H(Q) \cap W_2^1(Q)$; y por el *Teorema de Riesz* existe un único $u \in \hat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$ que satisface (3-7) para todo $\varphi \in \hat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$.

Observación: Este uso del teorema de Riesz es equivalente al Teorema de Lax-Milgram, por lo que se puede encontrar en la literatura en cualquiera de sus dos formas. Bajo ciertas condiciones es posible incluso suprimir la exigencia sobre la simetría [120, 121].

(b2) Consideremos ahora el caso $\langle f_0 \rangle_Q = 0$. Se
a $\varphi \in W^1_2(Q)$, podemos escribirla como

$$\varphi = \psi + \langle \varphi \rangle_Q \,,$$

con $\langle \psi \rangle_Q = 0, \ \psi \in H(Q) \cap W_2^1(Q)$. Pero

$$-b(\varphi) = \langle [f_0, \psi] \rangle_Q + \left[\langle f_0 \rangle_Q, \langle \varphi \rangle_Q \right] - \left\langle \left[f_i, \frac{\partial \psi}{\partial \xi_j} \right] \right\rangle_Q$$
$$= \langle [f_0, \psi] \rangle_Q - \left\langle \left[f_i, \frac{\partial \psi}{\partial \xi_j} \right] \right\rangle_Q$$
$$= \left\langle \left[-A_{ij} \frac{\partial u}{\partial \xi_j}, \frac{\partial \psi}{\partial \xi_i} \right] \right\rangle_Q = \left\langle \left[-A_{ij} \frac{\partial u}{\partial \xi_j}, \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_i} \right] \right\rangle_Q$$

Por lo tanto, *existe* una función u, obtenida a partir de ψ , por el teorema de Riesz, que satisface (3-3) para todo $\varphi \in W_2^1(Q)$.

Para la *unicidad* (salvo una constante aditiva) supongamos que existen $u_1, u_2 \in W_2^1(Q)$ que satisfacen (3-3) y supongamos, además, que $u_1 - u_2$ no es constante. En tal caso la función

$$v = u_1 - u_2 - \langle u_1 - u_2 \rangle_{\mathcal{O}} \not\equiv 0$$

satisface (3-7) para $f_0 = f_i = 0$. Pero como $[v, v]_A = 0$, esto implicaría que $v \equiv 0$, llegando a una contradicción.

3.2.1. Condiciones de contacto perfecto

Supongamos que en el interior del dominio Q se tienen determinadas superficies cerradas, a las que llamaremos superficies de contacto, $\Gamma \subset Q \setminus \partial Q$ tales que

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(A_{ij}(y) \frac{\partial u}{\partial y_j}(y) \right) = f_0(y) + \frac{\partial}{\partial y_k} f_k(y) \qquad \text{en } Q \setminus \Gamma, \qquad (3-8)$$

$$\left\|A_{ij}\frac{\partial u}{\partial y_j}n_i - f_i n_i\right\| = 0, \qquad \text{sobre } \Gamma, \qquad (3-9)$$

$$\llbracket u \rrbracket = 0, \qquad \text{sobre } \Gamma. \qquad (3-10)$$

A estas condiciones (3-9)-(3-10) se les conoce como condiciones de *contacto perfecto*.

Este sistema, completado con condiciones de contorno se conoce como formulación fuerte, y está bien planteado en $C^2(Q \setminus \Gamma)$. Multiplicando (3-8) por φ e integrando en el dominio, y usando (3-9)-(3-10), se obtiene nuevamente la identidad integral (3-3). Esto quiere decir que (3-2) admite soluciones generalizadas de (3-8)-(3-10) si se consideran sobre Γ discontinuidades finitas en A_{ij} o f_k .

3.2.2. Condiciones de contacto imperfecto

Analicemos ahora el siguiente problema:

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(A_{ij}(y) \frac{\partial u}{\partial y_j}(y) \right) = f_0(y) + \frac{\partial}{\partial y_k} f_k(y) \qquad \text{en } Q \setminus \Gamma, \qquad (3-11)$$

$$\left[\!\left[A_{ij}\frac{\partial u}{\partial y_j}n_i - f_i n_i\right]\!\right] = 0, \qquad \text{sobre } \Gamma, \qquad (3-12)$$

$$A_{ij}\frac{\partial u}{\partial y_j}n_i = f_i n_i + \beta \llbracket u \rrbracket, \qquad \text{sobre } \Gamma, \qquad (3-13)$$

donde β es una función matricial de $M \times M$ simétrica y semidefinida positiva (i.e. $\forall \xi \in \mathbb{R}^M$: $\beta_{ij}\xi_i\xi_j \geq 0$). A las nuevas condiciones sobre las superficies de contacto se le conocen como condiciones de *contacto imperfecto*, y el contacto perfecto es un caso límite cuando $\beta = \infty$.

Multiplicando (3-11) por φ e integrando en el dominio, ahora con las condiciones de contacto imperfecto (3-12)-(3-13) se obtiene

$$\left\langle \left[A_{ij} \frac{\partial u}{\partial y_j}, \frac{\partial \varphi}{\partial y_i} \right] \right\rangle_Q + \oint_{\Gamma} \left[\beta \left[u \right] , \left[\varphi \right] \right] dS = - \left\langle \left[f_0, \varphi \right] \right\rangle_Q + \left\langle \left[f_k, \frac{\partial \varphi}{\partial y_k} \right] \right\rangle_Q.$$
(3-14)

Llamaremos solución Q-periódica generalizada de (3-11)-(3-13) a aquella función $u \in W_2^1(Q)$ que satisfaga (3-14) para toda función de prueba $\varphi \in W_2^1(Q)$.

Observación: En las formulaciones débiles presentadas se ha utilizado la periodicidad de las funciones A_{ij} , f_k , $u \neq \varphi$. Para condiciones de frontera más generales (tipo Newman o Dirichlet)

aparecen también otros sumandos (Sec. 2.3).

Lema 9. Si las funciones $A_{ij}(y)$ satisfacen

$$\left\langle \left[A_{ij}(y) \frac{\partial \phi}{\partial y_j}, \frac{\partial \phi}{\partial y_i} \right] \right\rangle_Q \geqslant C \left\langle \left[\frac{\partial \phi}{\partial y_i}, \frac{\partial \phi}{\partial y_i} \right] \right\rangle_Q, \quad C > 0$$
(3-4)

para todo $\phi \in W_2^1(Q \setminus \Gamma)$, entonces (3-11)-(3-13) tiene solución Q-periódica generalizada, si y solo si,

$$\langle f_0 \rangle = 0. \tag{3-5}$$

Además, esta solución es única salvo una constante aditiva.

La demostración de la necesidad (a) es idéntica a la del Lema 8.

Demostración: Suficiencia (b). Esta demostración es similar a la anterior, por lo que omitiré algunos pasos, pero mostraremos con un poco más de detalles los pasos donde radican sus diferencias.

(b1) Considerando solamente soluciones en el subespacio $\widehat{H}(Q)$ se obtiene (3-6). Por la hipótesis (3-4), se tiene la desigualdad

$$\|u\|_{L^2}^2 \le \frac{N}{2C} \left\langle \left[A_{ij} \frac{\partial u}{\partial y_j}, \frac{\partial u}{\partial y_i} \right] \right\rangle$$

Sumando con (3-4) nos permite obtener

$$\|u\|_{W_2^1}^2 \le \frac{N+2}{2C} \left\langle \left[A_{ij}\frac{\partial u}{\partial y_j}, \frac{\partial u}{\partial y_i}\right] \right\rangle,$$

de donde se deriva

$$\frac{2C}{N+2} \|u\|_{W_2^1}^2 \le \left\langle \left[A_{ij} \frac{\partial u}{\partial y_j}, \frac{\partial u}{\partial y_i} \right] \right\rangle + \oint_{\Gamma} \left[\beta \left[u \right], \left[u \right] \right] dS$$

(por ser β positiva).

Haciendo uso del teorema de Riesz en

$$A_{\beta}(u,\varphi) \equiv [u,\varphi]_{A_{\beta}} \equiv \left\langle \left[A_{ij} \frac{\partial u}{\partial y_{j}}, \frac{\partial \varphi}{\partial y_{i}} \right] \right\rangle + \oint_{\Gamma} \left[\beta \left[u \right] , \left[\varphi \right] \right] dS$$

$$= - \left\langle [f_{0},\varphi] \right\rangle_{Q} + \sum_{k=1}^{n} \left\langle \left[f_{k}, \frac{\partial \varphi}{\partial \xi_{j}} \right] \right\rangle_{Q} \equiv b(\varphi),$$
(3-15)

 $\exists ! u \in \widehat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$ que satisface (3-15) para todo $\varphi \in \widehat{H}(Q) \cap W_2^1(Q)$.

(b2) La extensión a $W_2^1(Q)$, cuando $\langle f_0 \rangle = 0$ en esta demostración, es análoga a la del Lema 8, pero cambiando $[u, \varphi]_A$ por $[u, \varphi]_{A_\beta}$.

La existencia de solución para el problema (3-11)-(3-13) también ha sido abordado por métodos de convergencia funcional débil en [122].

3.3. Conceptos básicos del análisis asintótico

A continuación analizaremos cómo se relacionan las soluciones del problema original y el homogeneizado. Para ello haremos uso del principio del máximo enunciado en la Sección 3.1. Dos conceptos fundamentales de los que se hará uso a lo largo de todo el trabajo: expansión asintótica y solución asintótica formal [3].

Sea B_{ε} un espacio normado, denotaremos por

$$u^{(M)} = \sum_{i=0}^{M} \varepsilon^{i} u_{i}(x,\varepsilon), \qquad u_{i}(x,\varepsilon) \in B_{\varepsilon}.$$
(3-16)

La serie

$$u^{(\infty)} = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^{i} u_{i}(x,\varepsilon), \qquad (3-17)$$

independientemente de su convergencia, se dice expansión asintótica (e.a.) de $f(x, \varepsilon)$ si y solo si para todo $N \in \mathbb{N}$ existe M tal que

$$\forall m \ge M : f(x,\varepsilon) - u^{(m)} = O(\varepsilon^N) \text{ en la norma de } B_{\varepsilon}, \tag{3-18}$$

y se denota por $u^{(\infty)} \sim f(x, \varepsilon)$. Esta es una relación de equivalencia en el sentido:

$$\sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^{i} u_{i}(x,\varepsilon) \sim \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^{i} v_{i}(x,\varepsilon) \Leftrightarrow \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^{i} (u_{i}(x,\varepsilon) - v_{i}(x,\varepsilon)) \sim 0,$$

Sean H_s^{ε} y H_d^{ε} dos familias de espacios de Banach ($\varepsilon > 0$), y los operadores $L^{\varepsilon} : H_s^{\varepsilon} \to H_d^{\varepsilon}$ están definidos para alguna vecindad reducida de 0. Para $f \in H_d^{\varepsilon}$, se dice que la serie (3-17) es una solución asintótica formal (s.a.f.) del problema $L^{\varepsilon}u = f$ si y solo si para todo $N \in \mathbb{N}$ existe M tal que

$$\forall m \ge M : L^{\varepsilon} u^{(m)} - f(x, \varepsilon) = O(\varepsilon^N) \text{ en la norma de } H_d^{\varepsilon}.$$
 (3-19)

Supongamos que para cualquier función $f \in H_d$ existe la solución del problema

$$L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} = f,$$

y conocemos a priori que satisface el estimado

$$\|u^{\varepsilon}\|_{H_s} \le C \|f\|_{H_d}, \tag{3-20}$$

para alguna constante C independiente de f y de ε (los detalles de la obtención de este estimado, en nuestro caso, se verán más adelante). Por (3-19)

$$L^{\varepsilon}(u^{(k)} - u^{\varepsilon}) = L^{\varepsilon}u^{(k)} - L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} + L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} - f = O(\varepsilon^{N}),$$

pero entonces, como (3-22) es independiente del miembro derecho:

$$\|u^{(k)} - u^{\varepsilon}\|_{H_s} \le C \|O(\varepsilon^N)\|_{H_d},$$

es decir,

$$\|u^{(k)} - u^{\varepsilon}\|_{H_s} = O(\varepsilon^N).$$
(3-21)

Es decir, existen constantes $A \ge \varepsilon_0$, tales que

$$\|u^{(k)} - u^{\varepsilon}\|_{H_s} \le A\varepsilon^N$$

para todo $0 < \varepsilon < \varepsilon_0$.

En ocasiones la constante C de (3-22) pue de depender de ε de forma tal que

$$\exists \alpha > 0: \quad C \le C_0 \varepsilon^{-\alpha},$$

 C_0 no dependiente de ε , obteniéndose

$$\|u^{(k)} - u^{\varepsilon}\|_{H_s} = O(\varepsilon^{N-\alpha}).$$

La demostración en estos casos es la misma, y en general pudiéramos enunciar este resultado como sigue.

Teorema 10. Sea L^{ε} un operador lineal, si en cierto espacio existe la solución u^{ε} del problema $L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} = f, y$ se satisface

$$\|u^{\varepsilon}\|_{H_s} \le C\varepsilon^K \|f\|_{H_d},\tag{3-22}$$

 $(C > 0 \ y \ C, K$ independientes de ε). Entonces toda solución asintótica formal es expansión asintótica de u^{ε} .

Para el caso en que L^{ε} no es lineal, es posible debilitar estas condiciones en casos particulares, sin embargo no serán abordadas pues escapan a nuestros objetivos [7,116].

Para nuestro estudio utilizaremos el estimado que nos brinda el Teorema 7. En el Capítulo 4 se encontrará una s.a.f. de la forma

$$u_0 + \varepsilon u_1 + \varepsilon^2 u_2 + \varepsilon^3 u_3 + \varepsilon^4 u_4$$

donde cada u_i es periódica y se satisface (3-20) para el operador

$$L^{\varepsilon}(\cdot) = \nabla \cdot (A^{\varepsilon} \nabla(\cdot)), \ A^{\varepsilon} = A(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{x}{\varepsilon^2}),$$
(3-23)

siendo A un tensor periódico con respecto a cada variable. En particular

$$L^{\varepsilon}u^{(4)} - f = L^{\varepsilon}(u^{(4)} - u^{\varepsilon}) = O(\varepsilon), \qquad (3-24)$$

en la norma de L_2 , por lo que los Teoremas 7 y 10 garantizan que

$$\|u^{(4)} - u^{\varepsilon}\|_{W_2^1} = O(\varepsilon), \tag{3-25}$$

donde u^{ε} es la solución de $L^{\varepsilon}u^{(k)} = f$. Además, por la propia construcción de la s.a.f.

$$\|u^{(4)} - u_0\|_{W_2^1} = O(\varepsilon),$$

y utilizando la desigualdad triangular, se obtiene

$$||u_0 - u^{\varepsilon}||_{W_2^1} = O(\varepsilon).$$
 (3-26)

3.4. Justificación del Método de Elementos Finitos

La literatura matemática y de ingeniería reciente se ha ocupado de formar bases amplias para la solución numérica de ecuaciones diferenciales desde el punto de vista del análisis funcional [123,124]. El propósito de esta sección es aplicar la teoría de espacios abstractos presentada en las secciones anteriores en un marco en el que se puedan establecer resultados de existencia, unicidad e incluso convergencia, de los cuales depende el Método de Elementos Finitos.

Sea H un espacio de Hilbert y $V \subset H$ un subespacio cerrado. Definiremos los problemas siguientes [107]:

Problema Variacional. Sean A(u, v) una forma bilineal, acotada y definida positiva en V, y una aplicación lineal $f \in V'$. Encontrar

$$u \in V$$
, tal que $A(u, v) = f(v)$ $\forall v \in V$.

Aproximación de Ritz-Galerkin. Dado un subespacio de dimensión finita $V_h \subset V$. Sean A(u, v) una forma bilineal, acotada y definida positiva en V y una aplicación lineal $f \in V'$. Encontrar

$$u \in V_h$$
, tal que $A(u, v) = f(v)$ $\forall v \in V_h$.

Los siguientes teoremas son consecuencia directa de los teoremas de representación de Ritz y de Lax-Milgram [107].

Teorema 11. Los Problemas Variacional y de Aproximación de Ritz-Galerkin poseen soluciones únicas $u y u_h$, respectivamente.

Teorema 12 (fundamental de ortogonalidad de Galerkin). Sea A(u, v) bilineal, acotada, definida positiva y simétrica. Las soluciones u y u_h de los Problemas Variacional y de Aproximación de Ritz-Galerkin, respectivamente, satisfacen

$$A(u - u_h, v) = 0 \qquad \forall v \in V_h.$$
(3-27)

Es decir, u_h es la proyección de u en V_h bajo el producto escalar A(u, u). Además, con la norma $||u||_A = \sqrt{A(u, u)}$, se cumple:

$$||u - u_h||_A = \min_{v \in V_h} ||u - v||_A.$$
(3-28)

Corolario 13 (método de Rayleigh-Ritz). En el caso simétrico, u_h minimiza en V_h el funcional cuadrático

$$Q(v) = A(v, v) - 2f(v).$$
(3-29)

Corolario 14. En el caso simétrico, si V es completo y el subespacio $V_h \subset V$ es cerrado y convexo, existe una única $u_h \in V_h$ que minimiza (3-29).

El siguiente teorema nos muestra que es posible encontrar estimados del error en el espacio original, aún en el caso no simétrico [107, 115, 124, 125].

Lema 15 (de Céa). Sean $u \ y \ u_h$ las soluciones de los Problemas Variacional y de Aproximación de Ritz-Galerkin, respectivamente, entonces

$$||u - u_h||_H \le K \min_{v \in V_h} ||u - v||_H,$$

donde K > 0 es una constante independiente de V_h . Esta constante se puede obtener a partir de la continuidad y carácter definido positivo de A en la forma $K = \frac{C}{\alpha}$ donde

$$|A(u,v)| \le C ||u||_H ||v||_H, \qquad A(w,w) \ge \alpha ||w||_H^2, \qquad \forall u, v \in H, w \in V.$$

Demostración. Restando las ecuaciones de ambos problemas se tiene

$$A(u - u_h, v) = 0, \quad \forall v \in V_h,$$

esto, junto al carácter definido positivo lleva a

$$\alpha \|u - u_h\|_H^2 \le A(u - u_h, u - u_h) = A(u - u_h, u - v) + A(u - u_h, v - u_h)$$

= $A(u - u_h, u - v).$

Finalmente, por la continuidad

$$\alpha \|u - u_h\|_H^2 \le C \|u - u_h\|_H \|u - v\|_H,$$

es decir,

$$||u - u_h||_H \le \frac{C}{\alpha} ||u - v||_H \qquad v \in V_h,$$
(3-30)

y como V_h es cerrado: existe el mínimo para (3-30) y la desigualdad se cumple.

Corolario 16. En el caso simétrico:

$$\|u - u_h\|_H \le \sqrt{\frac{C}{\alpha}} \min_{v \in V_h} \|u - v\|_H,$$
 (3-31)

(las mismas C y α obtenidas de la continuidad y el carácter definido positivo).

Observación: Este teorema nos indica que la Aproximación de Ritz-Galerkin es cuasioptimal para el Problema Variacional, esto es, que el error de u_h es proporcional al menor error posible en el espacio V_h .

La principal consecuencia de los resultados aquí presentados es la condición suficiente para la convergencia del método de aproximación. Reduciendo el problema variacional en un espacio V a la construcción de una familia $\{V_h\}_h$ de subespacios de dimensión finita $V_h \subset V$ tales que

$$\lim_{h \to 0} \inf_{v \in V_h} \|u - v\| = 0,$$

para cada $u \in V$ (o al menos para un conjunto que contenga a la solución del problema). En particular si se puede garantizar que existan las soluciones de

$$A(u_h, v) = f(v) \qquad \forall v \in V_h,$$

a dicha familia se le conoce como familia asociada discreta y se considera convergente cuando

$$\lim_{h \to 0} \|u_h - u\| = 0.$$

En el Capítulo 5 se precisarán técnicas específicas del Método de Elementos Finitos para la construcción de esos espacios.

Parte II

Resultados

Capítulo 4

Homogeneización a escalas múltiples

En el Capítulo 2 fue formulado el problema de la conducción del calor para un material compuesto con multiples escalas y contacto imperfecto. Utilizaremos ahora el M.H.A. para encontrar las propiedades efectivas de dicho material. Para esto se tienen que resolver ecuaciones diferenciales parciales en las celdas periódicas en cada escala, conocidos como Problemas Locales. Estos problemas serán resueltos de forma analítica para dos casos simples: para compuestos laminados (Sec. 4.2) y fibrosos (Sec. 4.3). Las fórmulas analíticas obtenidas serán validadas y aplicadas de manera directa en diversos contextos al final de este capítulo. En el Capítulo 5 se propondrá una combinación de métodos numéricos basados en descomposición de dominios y elementos finitos para resolver problemas más complejos.

Para aproximar la solución $u^{\varepsilon}(x)$ construiremos una solución as intótica formal (s.a.f.) de la forma

$$u^{(\infty)}(x) = u_0(x, y, z) + \varepsilon u_1(x, y, z) + \varepsilon^2 u_2(x, y, z) + \cdots$$
(4-1)

donde cada u_i se considera Y-periódica respecto a y y Z-periódica respecto a z, y

$$y = \frac{x}{\varepsilon}, \ z = \frac{x}{\varepsilon^2}.$$
 (4-2)

Para nuestro estudio es suficiente considerar solo los primeros 5 términos de esta serie, es decir

$$u^{\varepsilon}(x) = u_0(x, y, z) + \varepsilon u_1(x, y, z) + \varepsilon^2 u_2(x, y, z) + \varepsilon^3 u_3(x, y, z) + \varepsilon^4 u_4(x, y, z).$$
(4-3)

Introduzcamos la siguiente notación:

$$L^{\varepsilon}(\cdot) = \nabla \cdot (A^{\varepsilon} \nabla(\cdot)), \quad A^{\varepsilon} = A(y, z), \quad u^{\varepsilon} = u(x, y, z), \quad (4-4)$$

De esta forma, $L^{\varepsilon}u^{\varepsilon}=-f$ y utilizando la regla de la cadena

$$\frac{dF}{dx_i} = \frac{\partial F}{\partial x_i} + \varepsilon^{-1} \frac{\partial F}{\partial y_i} + \varepsilon^{-2} \frac{\partial F}{\partial z_i}$$

se obtiene:

$$L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} = \nabla \cdot \left(A^{\varepsilon}\nabla_{x}u + \varepsilon^{-1}\nabla_{y}u + \varepsilon^{-2}\nabla_{z}u\right)$$

= $\nabla_{x} \cdot (A\nabla_{x}u) + \varepsilon^{-1}\nabla_{y} \cdot (A\nabla_{x}u) + \varepsilon^{-2}\nabla_{z} \cdot (A\nabla_{x}u)$
+ $\varepsilon^{-1}\left(\nabla_{x} \cdot (A\nabla_{y}u) + \varepsilon^{-1}\nabla_{y} \cdot (A\nabla_{y}u) + \varepsilon^{-2}\nabla_{z} \cdot (A\nabla_{y}u)\right)$
+ $\varepsilon^{-2}\left(\nabla_{x} \cdot (A\nabla_{z}u) + \varepsilon^{-1}\nabla_{y} \cdot (A\nabla_{z}u) + \varepsilon^{-2}\nabla_{z} \cdot (A\nabla_{z}u)\right).$

Dicho operador puede ser reescrito de la forma siguiente

$$L^{\varepsilon} = \varepsilon^{-4}L^1 + \varepsilon^{-3}L^2 + \varepsilon^{-2}L^3 + \varepsilon^{-1}L^4 + \varepsilon^0 L^5, \qquad (4-5)$$

donde

$$L^{1} = \nabla_{z} \cdot (A\nabla_{z}),$$

$$L^{2} = \nabla_{y} \cdot (A\nabla_{z}) + \nabla_{z} \cdot (A\nabla_{y}),$$

$$L^{3} = \nabla_{x} \cdot (A\nabla_{z}) + \nabla_{y} \cdot (A\nabla_{y}) + \nabla_{z} \cdot (A\nabla_{x}),$$

$$L^{4} = \nabla_{x} \cdot (A\nabla_{y}) + \nabla_{y} \cdot (A\nabla_{x}),$$

$$L^{5} = \nabla_{x} \cdot (A\nabla_{x}).$$
(4-6)

Aplicando (formalmente) el operador L^{ε} a la serie descrita, agrupando por potencias de ε , e igualando a cero los coeficientes de dichas potencias; de (2-4),(2-6) y (2-5), se obtiene la siguiente cadena recurrente de problemas:

$$de \ \varepsilon^{-4} \ y \ \varepsilon^{-2}: \begin{cases} L^{1}u_{0} = 0 & en \ \Omega \setminus \Gamma^{\varepsilon}, \\ A^{(1)}\nabla_{z}u_{0}^{(1)}n^{(1)} = 0 & sobre \ \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ A^{(1)}\nabla_{z}u_{0}^{(1)}n^{(1)} = B_{2} \llbracket u_{0} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ \llbracket A \nabla_{z}u_{0} \cdot n \rrbracket = 0 & sobre \ \Gamma^{\varepsilon}. \end{cases}$$

$$de \ \varepsilon^{-3} \ y \ \varepsilon^{-1}: \begin{cases} L^{1}u_{1} + L^{2}u_{0} = 0 & en \ \Omega \setminus \Gamma^{\varepsilon}, \\ A^{(1)} (\nabla_{z}u_{1} + \nabla_{y}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{1} \llbracket u_{0} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ \llbracket A^{(1)} (\nabla_{z}u_{1} + \nabla_{y}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{2} \llbracket u_{1} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ \llbracket A^{(1)} (\nabla_{z}u_{1} + \nabla_{y}u_{0}) \cdot n \rrbracket = 0 & sobre \ \Gamma^{\varepsilon}. \end{cases}$$

$$de \ \varepsilon^{-2} \ y \ \varepsilon^{0}: \begin{cases} L^{1}u_{2} + L^{2}u_{1} + L^{3}u_{0} = 0 & en \ \Omega \setminus \Gamma^{\varepsilon}, \\ A^{(1)} (\nabla_{z}u_{2} + \nabla_{y}u_{1} + \nabla_{x}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{1} \llbracket u_{1} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Y}, \\ A^{(1)} (\nabla_{z}u_{2} + \nabla_{y}u_{1} + \nabla_{x}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{2} \llbracket u_{2} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ \llbracket A^{(1)} (\nabla_{z}u_{2} + \nabla_{y}u_{1} + \nabla_{x}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{2} \llbracket u_{2} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ \llbracket A^{(1)} (\nabla_{z}u_{2} + \nabla_{y}u_{1} + \nabla_{x}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{2} \llbracket u_{2} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \\ \llbracket A^{(1)} (\nabla_{z}u_{2} + \nabla_{y}u_{1} + \nabla_{x}u_{0})^{(1)}n^{(1)} = B_{2} \llbracket u_{2} \rrbracket \text{ sobre } \Gamma^{\varepsilon}_{Z}, \end{cases}$$

$$(4-9)$$

También de ε^{-1} y ε^0 se obtienen

$$L^{1}u_{3} + L^{2}u_{2} + L^{3}u_{1} + L^{4}u_{0} = 0, (4-10)$$

$$L^{1}u_{4} + L^{2}u_{3} + L^{3}u_{2} + L^{4}u_{1} + L^{5}u_{0} = -f.$$
(4-11)

Observación: Nótese que todas estas ecuaciones tienen una forma similar:

$$L^1 U = F_0 + \frac{\partial F_i}{\partial \xi_i}$$

donde U es una función $Y \times Z$ -periódica. De acuerdo con el Lema 9 (Sección (3.2)), una condición necesaria para la existencia de soluciones Q-periódicas de esta ecuación es,

$$\langle F_0 \rangle_Q = 0, \tag{4-12}$$

donde $\langle \cdot \rangle$ denota el promedio sobre la celda periódica.

En término de las formulaciones desarrolladas en el presente capítulo, el formalismo asintótico se reduce a que, para cada ecuación es necesario:

- 1. obtener de la ecuación una expresión de la forma $L^1 u_{i+4} = F$,
- 2. aplicar el *Lema* 9 con $(m = 1, A = a, Y_1 = Z, \xi = z)$,
- 3. buscar una expresión para $\langle F \rangle_Z$ simplificando terminos nulos (usualmente mediante el Teorema de la Divergencia de Gauss-Ostrogradsky [126, 127] o casos particulares), y
- 4. deducir expresiones adecuadas (anzats) para cada $u_i (j = 1, ..., i + 4)$.

Un desarrollo análogo al de las secciones siguientes puede encontrarse en [4], aunque el enfoque y las notaciones siguen a [2, 3, 86].

4.1. Problemas locales y coeficientes efectivos

En el sistema (4-7), aplicando el lema sobre la variable z, obtenemos:

$$u_0 = u_0(x, y). \tag{4-13}$$

Es posible utilizar separación de variables en la primera ecuación de (4-8), para obtener una solución de la forma

$$u_1(x, y, z) = -\chi_y^k(z) \frac{\partial u_0}{\partial y_k}(x, y) + \tilde{u}_1(x, y),$$
(4-14)

donde χ_y^k es la solución del siguiente problema, el cual tiene soluciones únicas para cada $y \in Y$. Denotaremos por Γ_Z las superficies de contacto obtenidas al fijar y:

Primer Problema Local. Para cada $y \in Y, A(y, z) = (a_{ij}) \in C^{\infty}(\mathbb{R}^2, S_n)$ Z-periódica respecto a z, sea

$$\Lambda_y^1(\chi_y^j - z_j) = L^1(\chi_y^j - z_j) = -\frac{\partial}{\partial z_i} \left(a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_k} \right).$$

Encontrar la familia paramétrica de soluciones $\{\chi_y^j\}_{y\in Y}, \, \chi_y^j: \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ que satisfacen

$$\Lambda_y^1(\chi_y^j - z_j) = 0, (4-15)$$

$$\left[\!\left[A\nabla_z(z_j - \chi_y^j) \cdot n\right]\!\right]_{\Gamma_Z} = 0, \tag{4-16}$$

$$A^{(1)}\nabla_{z}(z_{j}-\chi_{y}^{j})^{(1)} n^{(1)} = -B_{2}(y,z) \left[\!\left[\chi_{y}^{j}\right]\!\right]_{\Gamma_{Z}},$$
(4-17)

$$\left\langle \chi_{y}^{j}\right\rangle_{Z} = 0. \tag{4-18}$$

Aplicando el Lema 9 en (4-9) para (x, y) fijo, es decir, sobre

$$L^1 u_2 = -L^2 u_1 - L^3 u_0, (4-19)$$

la condición para que (4-19) tenga solución Z-periódica es

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(\left\langle a_{ik} - a_{ij} \frac{\partial \chi_y^k}{\partial z_j} \right\rangle_Z \frac{\partial u_0}{\partial y_k} \right) = 0.$$
(4-20)

Introduciendo la notación

$$a_{ij}^{1} = \left\langle a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi_{y}^{j}}{\partial z_{k}} \right\rangle_{Z}, \qquad (4-21)$$

podemos reescribir (4-20) de la forma

$$-\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij}^1(y) \frac{\partial u_0}{\partial y_j} \right) = 0.$$
(4-22)

Observación: Estos coeficientes están homogeneizados respecto a Z, pero continúan respetando la periodicidad respecto a Y. Este nuevo tensor a_{ij}^1 heredan del original otras importantes propiedades como son: la *simetría* y el *carácter definido positivo*. Lo anterior nos permite utilizar el *Lema* 9 nuevamente. Demostraciones de esta importante propiedad se encuentran en [3, pp. 196–204], [37, pp. 36–44] y [86, pp. 59–62].

Siguiendo la misma metodología con la ecuación (4-22) obtenemos:

$$u_0 = u_0(x), (4-23)$$

y por (4-14):

$$u_1 = \tilde{u}_1(x, y).$$
 (4-24)

Utilizando los resultados anteriores, y realizando un proceso de separación de variables en (4-19) (análogo a (4-14)), se obtiene

$$u_2 = -\chi_y^k \left(\frac{\partial u_1}{\partial y_k} + \frac{\partial u_0}{\partial x_k}\right) + \tilde{u}_2(x, y).$$
(4-25)

Enfoquémonos ahora en (4-10), de la condición necesaria tenemos:

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\left(a_{ik} - a_{ij} \frac{\partial \chi_y^k}{\partial z_j} \right) \frac{\partial u_1}{\partial y_k} + \left(a_{ik} - a_{ij} \frac{\partial \chi_y^k}{\partial z_j} \right) \frac{\partial u_0}{\partial x_k} \right) \right\rangle_Z = 0,$$

que puede reescribirse de acuerdo con la notación (4-21) como

$$-\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij}^1(y) \frac{\partial u_1}{\partial y_j} \right) u_1 = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij}^1(y) \frac{\partial u_0}{\partial y_j} \right) y_k \frac{\partial u_0}{\partial x_k}.$$
 (4-26)

Podemos utilizar separación de variables:

$$u_1 = -\chi^j(y)\frac{\partial u_0}{\partial x_j}(x) + \tilde{u}_1(x).$$
(4-27)

para una función $\chi^j,$ Y-periódica, que satisface

$$\Lambda(\chi^j - y_j)\frac{\partial u_0}{\partial x_j} = 0.$$

De manera análoga al Primer problema local enunciaremos el siguiente problema:

Segundo Problema Local. Encontrar χ^j , Y-periódica, tal que

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij}^1 - a_{ik}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_k} \right) = 0, \qquad en \ Y \setminus \Gamma_Y, \qquad (4-28)$$

$$\llbracket A\nabla_y (y_j - \chi^j) \cdot n \rrbracket = 0 \qquad sobre \ \Gamma_Y, \tag{4-29}$$

$$A^{(1)}\nabla_{y}(y_{j} - \chi^{j})^{(1)} n^{(1)} = -B_{2}(y) [\![\chi^{j}]\!] \qquad sobre \ \Gamma_{Y}, \tag{4-30}$$

$$\left\langle \chi^j \right\rangle_Z = 0. \tag{4-31}$$

Utilizando la solución de este problema en (4-27) y sustituyendo en (4-25) entonces

$$u_2 = -\chi_y^k(z) \left(-\frac{\partial \chi^j}{\partial y_k}(y) \frac{\partial u_0}{\partial x_j}(x) + \frac{\partial u_0}{\partial x_k} \right) + \tilde{u}_2(x,y).$$
(4-32)

La condición necesaria y suficiente para que (4-11) tenga solución en la clase de las funciones periódicas en $Y \times Z$ es:

$$\langle L_{y,z}u_3 + (L_{x,z} + L_{y,y})u_2 + (L_{x,y} + L_{y,x})u_1 + L_{x,x}u_0 \rangle_Z = -f_z$$

Teniendo en cuenta (4-23), (4-27) y (4-32), y como además

$$\langle L_{y,z}u_3 + L_{y,y}u_2 + L_{y,x}u_1 \rangle_Y = 0,$$

entonces, aplicando el operador de promediación sobre la celda periódica Y, se obtiene:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left\langle a_{il} \frac{\partial}{\partial z_l} (\chi_y^k - z_k) \frac{\partial}{\partial y_k} (y_j - \chi^j) \frac{\partial v}{\partial x_j} \right\rangle_{Y \times Z} = -f(x).$$
(4-33)

La expresión anterior es equivalente a

$$-\hat{a}_{ij}\frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_j} = f, \qquad (4-34)$$

donde \hat{a}_{ij} son las componentes del tensor efectivo, definidas por

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle \left(a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_k} \right) - \left(a_{il} - a_{ik} \frac{\partial \chi_y^l}{\partial z_k} \right) \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} \right\rangle_{Y \times Z}.$$
(4-35)

De acuerdo con la notación de (4-21)-(4-22), podemos reescribir (4-35) como

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle a_{ij}^1 - a_{il}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} \right\rangle_Y, \tag{4-36}$$

donde

$$a_{ij}^1 = \left\langle a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_k} \right\rangle_Z$$

La ecuación (4-34) es precisamente la ecuación del problema con coeficientes homogéneos al que hemos hecho mención con anterioridad. Para fijar ideas, daremos una definición más precisa de lo que consideraremos como *Problema Homogeneizado*.

Problema Homogeneizado. Dado $A = (a_{ij})$ tensor simétrico y definido positivo $Y \times Z$ -periódico. Encontrar u_0 , de clase $C^2(\Omega)$, tal que

$$-\hat{a}_{ij}\frac{\partial^2 u_0}{\partial x_i \partial x_j} = f \qquad en \ \Omega, \tag{4-37}$$

$$u_0 = 0 \qquad sobre \ \partial\Omega. \tag{4-38}$$

Para los coeficientes efectivos definidos por (4-21) para la microescala y (4-36) para la macroescala. Siendo $\chi_y^j y \chi^j$ soluciones del Primer y Segundo Problemas Locales, respectivamente.

Para algunas aplicaciones [81, 128, 129], las soluciones del problema homogeneizado y las soluciones de primer orden no pueden adquirir algunas fluctuaciones de interés locales en los campos resultantes. Por lo tanto, al agregar terminos de orden superior, los comportamientos físicos y mecánicos locales dentro de los materiales se pueden captar con mayor precisión [3,81].

Continuando el algoritmo de homogeneización descrito es posible resolver también las ecuaciones (4-10) y (4-11) para obtener una s.a.f. de la forma (4-3). De aquí que

$$L^{\varepsilon}u^{\varepsilon} + f = \varepsilon \left(L^2 u_4 + L^3 u_3 + L4u_2 + L5u_1 \right) + O(\varepsilon^2),$$

donde L^{ε} es un operador lineal y todas son funciones son acotadas. En virtud del Teorema 7 podemos concluir, que la s.a.f. construida a partir de (4-23), (4-27) y (4-32) es una expansión asintótica de la solución original. Se tiene además la convergencia asintótica de la solución del problema homogeneizado a la solución del problema original (vease Sec. 3.3)

Presentaremos a continuación, a modo de resumen, el algoritmo de obtención de una s.a.f., abordando así todos los aspectos fundamentales de este capítulo:

Primero es necesario resolver el Primer y Segundo Problemas Locales

$$\Lambda_y^1(\chi_y^j - z_j) = -\frac{\partial}{\partial z_i} \left(a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z_k} \right) = 0, \left\langle \chi_y^j \right\rangle_Z = 0;$$
(4-15)

$$\Lambda^2(\chi^j - y_j) = -\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij}^1 - a_{ik}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_k} \right) = 0.$$
(4-28)

definiendo para ello los coeficientes efectivos para las distintas escalas:

$$a_{ij}^{1} = \left\langle a_{ij} - a_{ik} \frac{\partial \chi_{y}^{j}}{\partial z_{k}} \right\rangle_{Z}$$

$$(4-21)$$

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle a_{ij}^1 - a_{il}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y_l} \right\rangle_Y.$$
(4-36)

Aunque para la mayoría de las aplicaciones es suficiente con obtener estos coeficientes, en general también hemos encontrado el desarrollo (4-3). Para ello se resuelve el problema homogenizado (4-37)-(4-38) y se obtiene:

$$u_0 = u_0(x), (4-23)$$

$$u_1 = -\chi^j(y) \frac{\partial u_0}{\partial x_j}(x), \tag{4-27}$$

$$u_2 = -\chi_y^k(z) \left(-\frac{\partial \chi^j}{\partial y_k}(y) \frac{\partial u_0}{\partial x_j}(x) + \frac{\partial u_0}{\partial x_k} \right) + \tilde{u}_2(x,y).$$
(4-32)

Los Problemas Locales se pueden resolver analíticamente para muy pocas geometrías. Presentaremos a continuación una propuesta de metodología de resolución para problemas 1D (compuestos laminados) y 2D (compuestos fibrosos) sencillos.

4.2. Soluciones analíticas en un caso unidimensional

Múltiples aplicaciones, en especial ingenieriles, involucran medios laminados con múltiples escalas. Por ejemplo, en el contexto de láminas delgadas (*nanofabricated thin films*) [130–132] y en la Geomecánica [9, 133, 134] se han desarrollado modelos estructurales que involucran dominios parcialmente acotados, materiales funcionalmente graduados y multilaminados.

Para un medio laminado, si consideramos una cantidad finita de láminas perpendiculares a un eje, se tiene un problema de homogeneización unidimensional. En este caso, las funciones materiales dependen solo de una variable espacial y las derivadas involucradas en las ecuaciones diferenciales son ordinarias. Entonces, es posible encontrar soluciones analíticas de los problemas locales y, en consecuencia, fórmulas analíticas para coeficientes efectivos [53,67,135].

En nuestro caso se han considerado láminas heterogéneas, anisotrópicas y distribuidas de manera periódica todas perpendiculares al eje x_{ℓ} . Consideremos $x \equiv x_{\ell}$, $y \equiv y_{\ell}$ y $z \equiv z_{\ell}$, encontraremos a continuación una formulación explícita para los coeficientes efectivos de dicho medio considerando contacto perfecto entre las láminas. En este caso, Γ_Y y Γ_Z son conjuntos discretos $\Gamma_Y = \{y_i\}_{i=1}^{N_y}, \Gamma_Z = \{z_i\}_{i=1}^{N_z}$ $(N_y, N_z$ es el número de capas de las celdas), y el vector normal se convierte en $n = (\delta_{1\ell}, \delta_{2\ell}, \delta_{3\ell})$.

Observación: Las suposiciones hechas no exigen de las láminas ningún tipo de homogeneidad ni relaciones entre ellas. De la misma forma en que se ha considerado un medio laminado puede tomarse por ejemplo un medio funcionalmente graduado sin perdida de generalidad con iguales resultados [1,136]. En particular el ejemplo y las fórmulas que se obtienen a continuación se encuentran en [53].

Con estas nuevas simplificaciones los problemas locales se transforman en:

Primer Problema Local. Para cada $y \in Y$, sea $A(y, z) = (a_{ij}) \in C^{\infty}(\mathbb{R}^2, S_n)$ Z-periódica respecto a z.

Encontrar la familia paramétrica de soluciones $\{\chi_y^j\}_{y\in Y}, \chi_y^j: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ que satisfacen

$$-\frac{\partial}{\partial z} \left(a_{\ell j} - a_{\ell \ell} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z} \right) = 0 \qquad \qquad in \ Z \setminus \Gamma_Z, \tag{4-39}$$

$$\left\| a_{\ell j} - a_{\ell \ell} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z} \right\| = 0 \qquad \qquad on \ \Gamma_Z, \tag{4-40}$$

$$a_{\ell j} - a_{\ell \ell} \frac{\partial \chi_y^j}{\partial z} = -B_2(y, z) \left[\!\left[\chi_y^j\right]\!\right] \qquad on \ \Gamma_Z, \tag{4-41}$$

$$\left\langle \chi_{y}^{j}\right\rangle_{Z} = 0. \tag{4-42}$$

Segundo Problema Local. Para cada $A(y,z) = (a_{ij}) \in C^{\infty}(\mathbb{R}^2, S_n) \ Y \times Z$ -periódica, se define

$$a_{ij}^{1} = \left\langle a_{ij} - a_{i\ell} \frac{d\chi_{y}^{j}}{dz} \right\rangle_{Z}, \qquad (4-43)$$

donde $\{\chi_y^j\}_{y \in Y}, \chi_y^j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ son las soluciones del primer problema local 4.2. Encontrar $\chi^j : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ Y-periódica que satisface

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(a_{\ell j}^1 - a_{\ell \ell}^1 \frac{\partial \chi^j}{\partial y} \right) = 0, \qquad \qquad in \ Y \setminus \Gamma_Y, \qquad (4-44)$$

$$\left[\!\left[a_{\ell j}^{1}-a_{\ell \ell}^{1}\frac{\partial \chi^{j}}{\partial y}\right]\!\right]=0 \qquad on \ \Gamma_{Y}, \qquad (4-45)$$

$$a_{\ell j}^{1} - a_{\ell \ell}^{1} \frac{\partial \chi^{j}}{\partial y} = -B_{1}(y) \left[\!\left[\chi^{j}\right]\!\right] \qquad on \ \Gamma_{Y}, \tag{4-46}$$

$$\left\langle \chi^j \right\rangle_Y = 0. \tag{4-47}$$

Con la solución de estos problemas locales se obtiene el coeficiente efectivo

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle \left(a_{ij} - a_{i\ell} \frac{d\chi_y^j}{dz} \right) - \left(a_{i\ell} - a_{i\ell} \frac{d\chi_y^\ell}{dz} \right) \frac{d\chi^j}{dy} \right\rangle_Y \times Z$$

$$= \left\langle a_{ij}^1 - a_{i\ell}^1 \frac{d\chi^j}{dy} \right\rangle_Y.$$
(4-48)

Por otra parte las ecuaciones (4-39) y (4-40) indican que el flujo en la dirección de z_{ℓ} se mantiene constante en todo el medio:

$$a_{\ell\ell}^{(1)} \frac{d\chi_y^{j}}{dz}^{(1)} - a_{\ell j}^{(1)} = a_{\ell\ell}^{(2)} \frac{d\chi_y^{j}}{dz}^{(2)} - a_{\ell j}^{(2)} = a_{\ell j}^1.$$
(4-49)

Este resultado implica que (4-39) se satisface de manera idéntica y (4-41) se vuelve

$$a_{ij}^1 n_i = a_{\ell j}^1 = -B_2(y, z_k) \left[\!\!\left[\chi_y^j\right]\!\!\right], \quad \forall z_k \in \Gamma_Z.$$
 (4-50)

Multiplicando (4-49) por $a_{i\ell}a_{\ell\ell}^{-1}$ y promediando en la celda periódica se obtiene la siguiente expresión

$$\left\langle a_{i\ell}a_{\ell\ell}^{-1}a_{\ell j}\right\rangle_{Z} - \left\langle a_{i\ell}\frac{d\chi_{y}^{j}}{dz}\right\rangle_{Z} = \left\langle a_{i\ell}a_{\ell\ell}^{-1}\right\rangle_{Z}a_{\ell j}^{1},\tag{4-51}$$

que, sustituyendo en (4-43), permite encontrar un coeficiente efectivo de la forma

$$a_{ij}^{1} = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z} + \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} a_{\ell j}^{1}, \tag{4-52}$$

para $i\neq 2.$ Multiplicando (4-49) solo por $a_{\ell\ell}^{-1}$ y promediando en la celda periódica se tendría

$$\left\langle a_{\ell\ell}^{-1}a_{\ell j}\right\rangle_{Z} - \sum_{i=1}^{N_{z}} \left[\!\left[\chi_{y}^{j}\right]\!\right](z_{i}) = \left\langle a_{\ell\ell}^{-1}\right\rangle_{Z} a_{\ell j}^{1}, \qquad (4-53)$$

que, en (4-53), muestra la dependencia del coeficiente efectivo respecto al contraste de la solución del primer problema local $([\chi_y^j] |_{\Gamma_y})$, esto es:

$$a_{ij}^{1} = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z} + \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} \left\langle a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z}^{-1} \left\langle a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z} + \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} \left\langle a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z}^{-1} \sum_{i=1}^{N_{z}} \left[\left[\chi_{y}^{j} \right] (z_{i}). \right]$$

$$(4-54)$$

Aún más, combinando (4-50) con (4-53) se tiene

$$a_{\ell j}^{1} = \left(\left\langle a_{\ell \ell}^{-1} \right\rangle_{Z} + \sum_{k=1}^{N_{z}} B_{2}^{-1}(y, z_{k}) \right)^{-1} \left\langle a_{\ell \ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z},$$
(4-55)

el cual nos brinda finalmente una expresión general para el cálculo del coeficiente efectivo:

$$a_{ij}^{1} = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z} + \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} \left(\left\langle a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} + \sum_{k=1}^{N_{z}} B_{2}^{-1}(y, z_{k}) \right)^{-1} \left\langle a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z}.$$
 (4-56)

Para el caso de contacto perfecto este resultado coincide con los reportados por [2,137] y es un caso particular de [119,138]:

$$a_{ij}^{1} = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z} + \left\langle a_{i\ell} a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} \left(\left\langle a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Z} \right)^{-1} \left\langle a_{\ell\ell}^{-1} a_{\ell j} \right\rangle_{Z}.$$
(4-57)

En particular la componente $a_{\ell\ell}^1 = \left(\left\langle a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_Z + \sum_{k=1}^{N_z} B_2^{-1}(y, z_k) \right)^{-1}$, coincide con los resultados de [135].

El segundo problema local se puede resolver de la misma manera y, para la escala macroscópica, las expresiones son

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle a_{ij}^{1} \right\rangle_{Z} - \left\langle a_{i\ell}^{1} (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} a_{\ell j}^{1} \right\rangle_{Y} + \left\langle a_{i\ell}^{1} (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} \right\rangle_{Y} \hat{a}_{\ell j}, \\ = \left\langle a_{ij}^{1} \right\rangle_{Y} - \left\langle a_{i\ell}^{1} (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} a_{\ell j}^{1} \right\rangle_{Y} + \left\langle a_{i\ell}^{1} (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} \right\rangle_{Y} \left(\sum_{k=1}^{N_{y}} \left[\left[\chi^{j} \right] (y_{k}) \right] \right).$$

Ahora, usando (4-49), la expresión general para los componentes del tensor de conductividad efectiva es

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle a_{ij}^{1} \right\rangle_{Y} - \left\langle a_{i\ell}^{1} (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} a_{\ell j}^{1} \right\rangle_{Y} + \left\langle a_{i\ell}^{1} (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} \right\rangle_{Y} \left(\left\langle (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} \right\rangle_{Y} + \sum_{k=1}^{N_{y}} B_{1}^{-1} (y_{k}) \right)^{-1} \left\langle (a_{\ell\ell}^{1})^{-1} a_{\ell j}^{1} \right\rangle_{Y}.$$

$$(4-58)$$

En particular, la componente en la dirección perpendicular a las capas, es decir, para $i = j = \ell$, toma la forma

$$\hat{a}_{\ell\ell} = \left(\left\langle a_{\ell\ell}^{-1} \right\rangle_{Y \times Z} + \sum_{k=1}^{N_z} \left\langle B_2^{-1} \right\rangle_{Y} (z_k) + \sum_{k=1}^{N_y} B_1^{-1}(y_k) \right)^{-1}.$$
(4-59)

4.2.1. Caso particular trifásico

Para simplificar la notación consideraremos, sin perdida de generalidad $\ell = 2$. Definiremos un medio trifásico con tres escalas formado, en la escala microscópica por un médio homogeneo y un medio heterogeneo bifásico a escala nanométrica. Definiremos entonces el coeficiente de conductividad a partir de su valor en tres regiones $Y_1 \times Z_1$, $Y_1 \times Z_2$ y Y_2 , de la manera siguiente

$$Y_1 = [0, \Phi_0],$$
 $Y_2 = [0, 1] \setminus Y_1,$ $Z_1 = [0, \Phi_a]$ y $Z_2 = [0, 1] \setminus Z_1.$

Aquí Φ_0 es la concentración de la fase principal, y e dicha fase Φ_a es la concentración de la fase secundaria dentro de la fase principal. Las superficies de contacto de la nanoescala estará dada por la curva $\gamma = \gamma_1 \cup \gamma_2$ definida por

$$\gamma_1(t) = (t\Phi_0, \Phi_a), \gamma_2(t) = (\Phi_0, \Phi_a - \Phi_a t),$$
 $t \in [0, 1].$ (4-60)

El medio así descrito puede representarse como se muestra en la figura 4-1 donde se representa las fracciones volumétricas en las distintas escalas identificandolas en cada eje, esta representación es útil también en medios de dos y tres dimensiones donde no es posible representar la celdas $Y \times Z$.

Nótese que, en este caso, la familia paramétrica de soluciones del primer problema local (indexada por $y \in Y$) tiene solo dos elementos:

$$\{\chi_y^j\}_{y\in Y} = \{\chi_{y_1}^j, \chi_{y_2}^j\}, \quad \text{for } y_1 \in Y_1, y_2 \in Y_2.$$
(4-61)

Las soluciones generales tienen la forma

$$\chi_{y_1}^j = \begin{cases} C_{(11)}^j z + D_{(11)}^j, & 0 \le z < \Phi_a; \\ C_{(12)}^j z + D_{(12)}^j, & \Phi_a < z \le 1; \end{cases}$$
(4-62)

$$\chi_{y_2}^j = C_{(2)}^j z + D_{(2)}^j, \tag{4-63}$$

donde las constantes se determinan a partir de (4-44)-(4-46) y las condiciones de contorno.



Figura 4-1: Modelo volumétrico de un medio trifásico con separación de escalas (izquierda) y laminados resultantes para distintos valores de ϵ (derecha).

La ecuación (4-44) implica (para $y_I \in Y_I, I=1,2$ fija)

$$D_{(11)}^j = D_{(2)}^j = 0, (4-64)$$

$$C_{(2)}^j = -D_{(2)}^j, (4-65)$$

$$C_{(12)}^j = -D_{(12)}^j, (4-66)$$

y, de la 1-periodicidad se tienen las siguientes relaciones

$$C_{(2)}^{j} + D_{(2)}^{j} = D_{(2)}^{j}, (4-67)$$

$$C_{(12)}^{j} + D_{(12)}^{j} = D_{(11)}^{j}.$$
(4-68)

Sustituyendo (4-62), (4-64), (4-65) y (4-66) en (4-49) y (4-50), dentro de la región Y_1 se tiene

$$\begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} + \Phi_a B_2 & (1 - \Phi_a) B_2 \\ -a_{22}^{(1)} & a_{22}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{(11)}^j \\ C_{(12)}^j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{2j}^{(1)} \\ [a_{2j}]|_{\Gamma_y} \end{pmatrix}.$$
(4-69)

Para la región Y_2 se tiene la solución trivial

$$\chi_{y_2}^j = 0.$$

En el caso del coeficiente efectivo de la nanoescala, se puede representar separando la celda en dos regiones de continuidad. Y_1 y Y_2 .

De acuerdo con estos resultados para $\{\chi^j_{y_1},\chi^j_{y_2}\},$ (4-43) toma la forma

$$a_{ij}^{1}(y) = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - \mathbb{1}_{Y_{1}} \left(\Phi_{a} a_{i2}^{(1)} C_{(11)}^{j} + (1 - \Phi_{a}) a_{i2}^{(2)} C_{(12)}^{j} \right).$$
(4-70)

Substituyendo la solución (4-69) en (4-70), se obtiene

$$a_{ij}^{1\ (2)} = \langle a_{ij} \rangle_{Z},$$

$$a_{ij}^{1\ (1)} = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - \left(\frac{\left\langle a_{i2} a_{22}^{-1} a_{2j} \right\rangle_{Z}}{1 + B_2 \left\langle a_{22}^{-1} \right\rangle_{Z}} + \frac{\Phi_a (1 - \Phi_a) B_2 \left[\!\left[a_{i2}\right]\!\right] \left[\!\left[a_{2j}\right]\!\right]}{a_{22}^{(1)} a_{22}^{(2)} (1 + B_2 \left\langle a_{22}^{-1} \right\rangle_{Z})} \right).$$

$$(4-71)$$

Para el Segundo Problema Local, la nueva superficie de contacto
es $\Gamma_{(z)}=\{y=\Phi_0\}.$ La solución general tiene la forma

$$\chi^{j} = \begin{cases} C^{j(1)} + D^{j(1)}, & 0 \le y < \Phi_{0}; \\ C^{j(2)} + C^{j(2)}, & \Phi_{0} < y \le 1; \end{cases}$$
(4-72)

donde las constantes se determinan de manera similar a las constantes usadas en (4-62) y (4-63) para el Primer Problema Local, i. e.,

$$D^{j(1)} = 0,$$
 $D^{j(2)} = -C^{j(2)},$

y el sistema correspondiente es de la forma

$$\begin{pmatrix} a_{22}^{1\ (1)} + \Phi_0 B_1 & (1 - \Phi_0) B_1 \\ -a_{22}^{1\ (1)} & a_{22}^{1\ (2)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C^{j(1)} \\ C^{j(2)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{2j}^{1\ (1)} \\ [a_{2j}^1]|_{\Gamma_{(z)}} \end{pmatrix}.$$
(4-73)

Entonces, de la solución de este problema, finalmente:

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle a_{ij}^{1} \right\rangle_{Y} - \frac{\left\langle a_{i2}^{1} (a_{22}^{1})^{-1} a_{2j}^{1} \right\rangle_{Y}}{1 + B_{1} \left\langle (a_{22}^{1})^{-1} \right\rangle_{Y}} + \frac{\Phi_{0} (1 - \Phi_{0}) B_{1} \left[\left[a_{i2}^{1} \right] \right] \left[\left[a_{2j}^{1} \right] \right]}{a_{22}^{1} (a_{22}^{1})^{-1} a_{22}^{-1} (1 + B_{1} \left\langle (a_{22}^{1})^{-1} \right\rangle_{Y})}.$$
(4-74)

Observación: Los coeficientes $a_{ij}^{1(1)}, a_{ij}^{1(2)}$ corresponden a (4-71):

$$a_{ij}^{1}(y) = \langle a_{ij} \rangle_{Z} - 1_{Y_{1}} \left(\frac{\left\langle a_{i2} a_{22}^{-1} a_{2j} \right\rangle_{Z}}{1 + B_{2} \left\langle a_{22}^{-1} \right\rangle_{Z}} + \frac{\Phi_{a}(1 - \Phi_{a}) B_{2} \left[\!\left[a_{i2}\right]\!\right] \left[\!\left[a_{2j}\right]\!\right]}{a_{22}^{(1)} a_{22}^{(2)}(1 + B_{2} \left\langle a_{22}^{-1} \right\rangle_{Z})} \right).$$
(4-71)

4.3. Soluciones analíticas en un caso bidimensional utilizando funciones elípticas

Consideraremos a continuación un compuesto fibroso reforzado uniaxialmente, es decir, un sistema matriz-inclusión con inclusiones cilíndricas paralelas (Fig. 4-2). Utilizaremos la teoría



Figura 4-2: Modelo tridimensional, sección transversal y celda periódica (celdas cuadradas).

de las funciones de variable compleja para resolver el problema local en el caso en que tanto la matriz como las fibras son ocupadas por medios conductivos homogéneos, y sección transversal circular de las fibras.

Para unificar la forma de resolver cada uno de los Problemas Locales denotaremos por

 $W=Y,Z;\,\xi=y,z;\,\beta=B1,B2;$ y usando la propiedad de isotropía:

$$\mathcal{A} = (a(\xi)\delta_{ij}),$$

donde $\mathcal{A} = A, A^1$. Como en W los materiales componentes son homogéneos utilizaremos la siguiente notación para las fases:

$$a(\xi) = \begin{cases} a^{(1)}, \ \xi \in W^{(1)} & \text{(en la matriz)}, \\ a^{(2)}, \ \xi \in W^{(2)} & \text{(en la inclusión)}. \end{cases}$$

Se ha supuesto aquí que $a^{(2)} \neq 0$, puesto que el caso de las fibras vacías (material perforado) ha sido analizado detalladamente en en la literatura [139–141] y presenta algunas diferencias.

Seleccionemos uno de los problemas locales en cuestión y denotemos por $N_h \in \{\chi^h, \chi^h_y\}$ su solución $(h \in \{1, 2\})$. Sea $M_h(\xi) = N_h(\xi) + \xi_h$, y consideremos \mathcal{A} localmente isotrópica, es decir

$$a_{ij}(\xi) = \delta_{ij}a(\xi), (a > 0)$$

entonces se obtienen varias simplificaciones, como se verá a continuación.

De la estructura de (4-15) y (4-28) se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \delta_{ij} \frac{\partial M_k}{\partial y_j} \right) = \frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial M_k}{\partial y_i} \right) = 0, \quad \text{en } W \setminus \Gamma,$$
(4-75)

de donde resulta

$$-\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial N_k}{\partial y_i} \right) = \frac{\partial a}{\partial y_k}. \quad \text{en } W \setminus \Gamma.$$
(4-76)

En particular, si en cada subregión a es constante (materiales homogéneos):

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a \frac{\partial N_k}{\partial y_i} \right) = a \frac{\partial}{\partial y_i} \left(\frac{\partial N_k}{\partial y_i} \right) = 0, \tag{4-77}$$

y como a > 0, se obtiene la ecuación de Laplace:

$$\nabla^2 N_k = 0, \qquad \text{en } W \setminus \Gamma. \tag{4-78}$$

A las funciones que verifican esta condición se les llama funciones armónicas.

De las condiciones en la interfaz se tiene, además:

$$\left[\!\left[a\delta_{ij}\frac{\partial M_k}{\partial y_j}\right]\!\right]\eta_i = \left[\!\left[a\frac{\partial M_k}{\partial y_i}\right]\!\right]\eta_i = 0 \qquad \text{sobre } \Gamma, \tag{4-79}$$

$$a\delta_{ij}\frac{\partial M_k}{\partial y_j}\eta_i = a\frac{\partial M_k}{\partial y_i}\eta_i = \beta \llbracket M_k \rrbracket \quad \text{sobre } \Gamma, \tag{4-80}$$

lo que quiere decir que, bajo estas condiciones, el problema toma la forma:

Encontrar N_k , W – periódica, tal que

$$\nabla^2 N_k = 0, \qquad \qquad \text{en } W \setminus \Gamma \qquad (4\text{-}81)$$

$$-\llbracket a \frac{\partial N_k}{\partial \xi_i} \rrbracket \eta_i = \llbracket a \rrbracket \eta_k \qquad \text{sobre } \Gamma \qquad (4-82)$$

$$a\frac{\partial N_k}{\partial \xi_i}\eta_i = a\eta_k - \beta \llbracket N_k \rrbracket. \qquad \text{sobre } \Gamma \qquad (4-83)$$

Resolveremos este problema para k = 1, el caso k = 2 es análogo. Seguiremos la metodología propuesta por [142] aunque las notaciones y desarrollo siguen los trabajos de [141, 143, 144].

Nos centraremos solamente en el caso bidimensional descrito. De esta forma podemos establecer el paralelismo entre la sección transversal a la fibra con el plano complejo. Consideraremos que cada inclusión (plana) se encuentra *centrada* en el origen de coordenadas de la celda periódica, en el sentido de que dicho punto pertenece al dominio representado por esta. Denotaremos entonces por

$$\xi_1 = \mathcal{R}e(z), \qquad \xi_2 = \mathcal{I}m(z).$$

Supondremos un arreglo periódico de inclusiones circulares idénticas de radio R en un campo complejo uniforme perpendicular a los ejes de los cilindros. Las inclusiones se encuentran ubicadas en una red del plano generada por un par de vectores $\omega_1, \omega_2 \in \mathbb{C}$ tales que $\mathcal{I}m(\omega_2/\omega_1) \neq 0$ (i.e. no alineados con el origen). La geometría descrita responde a la estructura de *retículo* o *lattice* (un concepto general relacionado con estructuras periódicas y cuasiperiódicas en el plano complejo [100, 145]).

Una función compleja f(z) se puede descomponer en suma de dos funciones reales de dos variables de manera que $f(z) = f(\xi_1, \xi_2) = u(\xi_1, \xi_2) + iv(\xi_1, \xi_2)$, y si es diferenciable en un punto deben verificarse las condiciones de Cauchy-Riemann sobre dicha descomposición:

$$\frac{\partial u}{\partial \xi_1}\left(\xi_1,\xi_2\right) = \frac{\partial v}{\partial \xi_2}\left(\xi_1,\xi_2\right), \qquad \frac{\partial u}{\partial \xi_2}\left(\xi_1,\xi_2\right) = -\frac{\partial v}{\partial \xi_1}\left(\xi_1,\xi_2\right). \tag{4-84}$$

Dos funciones de clase C^2 que verifiquen las condiciones de Cauchy-Riemann son ambas armónicas, y se dice que son armónicas conjugadas (y son únicas salvo una constante aditiva). Esto quiere decir que, cuando la dimensión del problema (4-81)-(4-83) es 2, N_h se puede interpretar ya sea como la parte real o la parte imaginaria de una cierta función de variable compleja. Esto abre todo un panorama de métodos analíticos de resolución para estos problemas basado en elementos de la teoría del Análisis Complejo.

Debido a la estructura que adquiere el material en el plano, se buscarán funciones armónicas doblemente periódicas en las regiones de la matriz $(W^{(1)})$ e inclusión $(W^{(2)})$ para los problemas locales. Sabemos además, que existe alguna función analítica $\Phi(z)$ tal que

$$N^{(1)}(y) = \mathcal{R}e\{\Phi(z)\}.$$
(4-85)

Propondremos entonces soluciones de la forma

$$\Phi(z) = \begin{cases} \Phi_{in} = \sum_{n=0}^{\infty} c_{2n+1} z^{2n+1}, & z \in W^{(2)} & \text{(inclusion)}, \\ \Phi_{ex} = d_0 z + \sum_{n=0}^{\infty} d_{2n+1} \frac{\zeta^{(2n)}(z)}{(2n)!}, & z \in W^{(1)} & \text{(matriz)}. \end{cases}$$
(4-86)

donde $\zeta^{(2n)}(z) = \zeta(z, \omega_1, \omega_2)$ es la función Zeta de Weierstrass y sus derivadas pares. Los coeficientes indeterminados d_i, c_i son números reales.

Esta propuesta proviene de las propiedades que pose
e ζ [146–148], la cual es analítica en Y_1 y
 posee polos simples en $z \in \Omega = \{\omega_1 n + \omega_2 m : m, n \in \mathbb{Z}\}$ (los centros de las inclusiones). O
tra propiedad de interés es la quasi-periodicidad:

$$\zeta(z + \omega_{\alpha}) - \zeta(z) = \delta_{\alpha}$$

$$\zeta^{(n)}(z + \omega_{\alpha}) - \zeta^{(n)}(z) = 0, \quad \forall n \ge 1$$
(4-87)

donde $\delta_{\alpha} = 2\zeta\left(\frac{\omega_d}{2}\right)$ no depende de z y se cumple la relación de Legendre:

$$\delta_1\omega_2 - \delta_2\omega_1 = 2\pi i$$

Por ejemplo, en el caso de una celda cuadrada ($\omega_1 = 1, \omega_2 = i$):

$$\delta_1 = \zeta (z+1) - \zeta (z) = \pi, \qquad \delta_2 = \zeta (z+i) - \zeta (z) = -i\pi.$$

Por último, pero no menos importante, se tienen las siguientes propiedades de paridad

$$\zeta(-z) = -\zeta(z), \qquad \zeta(iz) = -i\zeta(z).$$

Del análisis anterior se obtiene que con la propuesta (4-86) se busca una función W-periódica que es analítica en $W \setminus \Gamma$, impar ($\Phi(-z) = -\Phi(z)$) y cuya parte real satisface (4-81).

Para que se satisfaga la condición de periodicidad, en (4-86), necesitamos que

$$0 = \mathcal{R}e\left(\Phi_{ex}(z+\omega_{\alpha}) - \Phi_{ex}(z)\right) = \mathcal{R}e\left(d_{0}\left(z+\omega_{\alpha}\right) - d_{0}z + \sum_{k=1}^{\infty} d_{k}\frac{\zeta^{(k-1)}\left(z+\omega_{\alpha}\right) - \zeta^{(k-1)}(z)}{(k-1)!}\right)$$
(4-88)

y por (4-87):

$$d_0 \mathcal{R}e(\omega_\alpha) + d_1 \mathcal{R}e(\zeta(z+\omega_\alpha) - \zeta(z)) = d_0 \mathcal{R}e(\omega_\alpha) + d_1 \mathcal{R}e(\delta_\alpha) = 0, \qquad (4-89)$$

y en particular para la celda cuadrada:

$$d_0 = -\frac{\delta_1}{\omega_1} d_1, \tag{4-90}$$

pues $\mathcal{R}e(\delta_2) = \mathcal{R}e(\omega_2) = 0.$

Observación: Por lo anterior, es común encontrar en la literatura directamente una propuesta de la forma

$$\Phi_{ex} = d_1 \left(\zeta(z) - \frac{\delta_1}{\omega_1} z \right) + \sum_{k=3}^{\infty} {}^o d_k \frac{\zeta^{(k-1)}(z)}{(k-1)!},$$

donde $\sum o$ indica que la suma se realiza solo por los índices impares.

Los coeficientes indeterminados d_k y c_k se obtienen de evaluar la propuesta en las condiciones de contacto (4-82)-(4-83). Pero antes es conveniente desarrollar a Φ_{ex} en serie de Laurent alrededor del origen (Φ_{in} ya está como serie de potencias). Dicho desarrollo es de la forma [77, 143]:

$$\Phi_{ex} = d_1 \eta_{11} z + \sum_{n=0}^{\infty} \left(d_{2n+1} z^{-2n-1} + \sigma_{2n+1} z^{2n+1} \right), \tag{4-91}$$

donde

$$\eta_{11} = -\frac{\delta_1}{\omega_1},\tag{4-92}$$

$$\sigma_l = \sum_{\substack{k=1\\k+l>2}}^{\infty} {}^o d_k \eta_{kl}, \tag{4-93}$$

$$\eta_{kl} = -\frac{(k+l-1)!}{(k-1)!l!} S_{k+l} = -\left(\!\!\binom{k}{l}\!\!\right) S_{k+l}, \quad (k+l>2), \tag{4-94}$$

$$S_{\lambda} = \sum_{m^2 + n^2 \neq 0} (m\omega_1 + n\omega_2)^{-\lambda}, \quad (\lambda > 2).$$
(4-95)

A la suma S_{λ} se le conoce como suma de lattices o suma reticular.

Observación: En (4-94) hemos denotado por

$$\binom{k}{l} = \binom{k+l-1}{l} = \binom{k+l-1}{k-1},$$

el cual es conocido como número multiconjunto [149]. Su valor representa la cantidad de formas en que se puede extraer un multiconjunto con k elementos de un conjunto con n elementos (número de k-combinaciones con repetición tomadas de un conjunto con n elementos). Este número está relacionado, además, con la generalización de los números combinatorios [150]:

$$\binom{-k}{l} = (-1)^l \left(\binom{k}{l} \right) \qquad (k, l \in \mathbb{Z}^+).$$

4.3.1. Obtención de los coeficientes indeterminados

Como se ha visto, conociendo los coeficientes indeterminados d_i , c_i de (4-86) se tiene la solución analítica para (4-81)-(4-83). Con esto podemos, además, obtener los coeficientes efectivos (4-35). Con tal objetivo, sustituiremos (4-91) y (4-86) en las condiciones (4-82)-(4-83) sobre la interfaz para obtener relaciones entre los coeficientes indeterminados que permitan obtener un sistema lineal de ecuaciones (infinito) donde d_i, c_i son las incógnitas.

El desarrollo realizado en la sección anterior es válido para cualquier tipo de compuesto fibroso siempre y cuando el origen de coordenadas se encuentre dentro de la fase formada por una fibra. Contemplaremos ahora solo el caso de una sección transversal circular de radio R, con resistividad constante en la interfaz Γ e isotropía y homogeneidad en ambas fases (Fig. 4-3).



Figura 4-3: Celda periódica cuadrada con una inclusión circular centrada

Podemos parametrizar la interfaz de manera tal que

$$\Gamma = \left\{ \left(\xi_1, \xi_2\right) : \xi_1 = R \cos \theta, \xi_2 = R \sin \theta, \quad -\pi \le \theta \le \pi \right\}$$
$$= \left\{ z = Re^{i\theta} : 0 < R < \frac{1}{2}, \quad -\pi \le \theta \le \pi \right\}.$$

Notemos que $\eta = (\eta_1, \eta_2) = (\cos \theta, \sin \theta)$ y $\xi = (\xi_1, \xi_2) = (R \cos \theta, R \sin \theta)$, es decir

$$\eta_1 = \frac{1}{R} \frac{d\xi_2}{d\theta}, \qquad \eta_2 = -\frac{1}{R} \frac{d\xi_1}{d\theta}.$$

La ecuación (4-82), para k = 1, se puede escribir de la manera siguiente:

$$-\left[\!\left[a\frac{\partial N^{(1)}}{\partial \xi_1} \cdot \eta_1 + a\frac{\partial N^{(1)}}{\partial \xi_2} \cdot \eta_2\right]\!\right] = -\left[\!\left[a\frac{\partial N^{(1)}}{\partial \xi_1} \cdot \frac{1}{R}\frac{d\xi_2}{d\theta} - a\frac{\partial N^{(1)}}{\partial \xi_2} \cdot \frac{1}{R}\frac{d\xi_1}{d\theta}\right] \\ = \left[\!\left[a\right]\!\right]\!\eta_1 = (a^{(1)} - a^{(2)})\eta_1, \quad \text{en } \Gamma.$$

Por otra parte, por las relaciones de Cauchy-Riemann (4-84) y la definición (4-85):

$$\frac{\partial N^{(1)}}{\partial \xi_1} = \frac{\partial \mathcal{R}e(\Phi)}{\partial \xi_1} = \frac{\partial \mathcal{I}m(\Phi)}{\partial \xi_2},\tag{4-96}$$

$$\frac{\partial N^{(1)}}{\partial \xi_2} = \frac{\partial \mathcal{R}e(\Phi)}{\partial \xi_2} = -\frac{\partial \mathcal{I}m(\Phi)}{\partial \xi_1}.$$
(4-97)

Teniendo en cuenta la regla de la cadena para la derivación en varias variables obtenemos

$$\left[\!\left[a\frac{d\mathcal{I}m(\Phi)}{d\theta}\right]\!\right] = (a^{(2)} - a^{(1)})R\cos\theta.$$
(4-98)

Sustituyendo los desarrollos (4-91),(4-86) en (4-98), el miembro izquierdo queda de la forma:

$$\begin{bmatrix} a \frac{d\mathcal{I}m(\Phi)}{d\theta} \end{bmatrix} = a^{(1)} \frac{d\mathcal{I}m(\Phi_{ex})}{d\theta} - a^{(2)} \frac{d\mathcal{I}m(\Phi_{in})}{d\theta}$$
$$= a^{(1)} \frac{d}{d\theta} \left(\sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \left[d_{1}\eta_{11}\delta_{1k} - d_{k}R^{-2k} + \sigma_{k} \right] R^{k} \sin(k\theta) \right)$$
$$- a^{(2)} \frac{d}{d\theta} \left(\sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} c_{k}R^{k} \sin(k\theta) \right)$$
$$= a^{(1)} \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \left[d_{1}\eta_{11}\delta_{1k} - d_{k}R^{-2k} + \sigma_{k} \right] kR^{k} \cos(k\theta)$$
$$- a^{(2)} \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} c_{k}kR^{k} \cos(k\theta),$$

y por otra parte, en el miembro derecho utilizaremos el siguiente desarrollo

$$R\cos\theta = \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o}\delta_{1k}kR^{k}\cos(k\theta).$$

Nótese que en ambos casos hemos usado la notación \sum^{o} para indicar que la suma se realiza solo en los índices impares.

En el análisis anterior hemos obtenido la siguiente ecuación, escrita en forma de desarrollo en series de coseno:

$$\sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \Big(a^{(1)} \Big[d_1 \eta_{11} \delta_{1k} - a_k R^{-2k} + \sigma_k \Big] - a^{(2)} c_k + (a^{(1)} - a^{(2)}) \delta_{1k} \Big) k R^k \cos(k\theta) = 0.$$
(4-99)

Finalmente, utilizaremos la ortogonalidad de $\{\cos(k\theta)\}_k$ en $L^2([-\pi,\pi])$ para igualar a cero cada término de la suma. Es decir, multiplicando de forma escalar en $L^2([-\pi,\pi])$ al miembro

derecho por $\cos(l\theta)$:

$$\int_{-\pi}^{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \Big(a^{(1)} \Big[d_{1} \eta_{11} \delta_{1k} - d_{k} R^{-2k} + \sigma_{k} \Big] - a^{(2)} c_{k} + (a^{(1)} - a^{(2)}) \delta_{1k} \Big) k R^{k} \cos(k\theta) \cos(l\theta) d\theta$$

=
$$\sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \Big(a^{(1)} \Big[d_{1} \eta_{11} \delta_{1k} - d_{k} R^{-2k} + \sigma_{k} \Big] - a^{(2)} c_{k} + (a^{(1)} - a^{(2)}) \delta_{1k} \Big) k R^{k} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(k\theta) \cos(l\theta) d\theta,$$

pero

$$\int_{-\pi}^{\pi} \cos(i\theta) \cos(j\theta) d\theta = \pi \delta_{ij}$$

entonces, cambiando el valor de $l \in \mathbb{N}$, se tiene que cada sumando de la serie se anula.

De esta forma se obtiene

$$\rho c_k = \left[d_1 \eta_{11} \delta_{1k} - d_k R^{-2k} + \sigma_k \right] + (1 - \rho) \delta_{1k}, \qquad (4-100)$$

donde $\rho = a^{(2)}/a^{(1)}$.

Observación: Para utilizar la ortogonalidad de $\{\cos(k\theta)\}_k$ en L^2 necesitamos que la serie formada por la suma de los cuadrados de los coeficientes que acompañan a $\cos(k\theta)$ sea convergente. Para esto es suficiente considerar la acotación de $\{d_k\}_k$ y $\{c_k\}_k$, pues entonces

$$\exists M > 0: \left| a^{(1)} \left[d_1 \eta_{11} \delta_{1k} - d_k R^{-2k} + \sigma_k \right] - a^{(2)} c_k + (a^{(1)} - a^{(2)}) \delta_{1k} \right|^2 < M,$$

y como 0 < R < 1/2, la serie $\sum_{k=1}^{\infty} {}^o k^2 R^{2k}$ es convergente y también lo será la de los cuadrados de los coeficientes.

Realizaremos un desarrollo similar para la ecuación (4-83). Notemos que en este caso (y teniendo en cuenta que $z|_{\Gamma} = Re^{i\theta}$) podemos escribir

$$\begin{bmatrix} N^{(1)} \end{bmatrix} = \mathcal{R}e(\Phi_{ex}) - \mathcal{R}e(\Phi_{in})$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \Big[d_{1}\eta_{11}\delta_{1k} + d_{k}R^{-2k} + \sigma_{k} \Big] R^{k} \cos(k\theta) - \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o}c_{k}R^{k} \cos(k\theta).$$
(4-101)

Sustituyendo los desarrollos anteriores en (4-83) obtenemos

$$a^{(2)} \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o}(c_{k} + \delta_{1k})kR^{k} \cos(k\theta) = \beta \left(\sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \left[d_{1}\eta_{11}\delta_{1k} + d_{k}R^{-2k} + \sigma_{k} \right] R^{k} \cos(k\theta) - \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o}c_{k}R^{k} \cos(k\theta) \right)$$

$$= \beta \sum_{k=1}^{\infty} {}^{o} \left(-c_{k} + d_{1}\eta_{11}\delta_{1k} + d_{k}R^{-2k} + \sigma_{k} \right) R^{k} \cos(k\theta).$$
(4-102)

Por último, utilizando nuevamente la ortogonalidad de $\{\cos(k\theta)\}_k$ en $L^2([-\pi,\pi])$, obtenemos

$$a^{(2)}kc_k + a^{(2)}\delta_{1k} = \beta \left(d_1\eta_{11}\delta_{1k} + d_k R^{-2k} + \sigma_k \right) - \beta c_k,$$

o sea,

$$c_k = \beta (\beta + a^{(2)}k)^{-1} \left(\left(d_1 \eta_{11} - \frac{a^{(2)}}{\beta} \right) \delta_{1k} + d_k R^{-2k} + \sigma_k \right).$$
(4-103)

Igualando los coeficientes c_k en (4-100) y (4-103) obtenemos el siguiente sistema infinito de ecuaciones lineales:

$$\frac{a^{(1)}}{a^{(2)}} \Big[d_1 \eta_{11} \delta_{1k} - d_k R^{-2k} + \sigma_k \Big] + \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(2)}} \delta_{1k}$$
$$= \beta (\beta + a^{(2)}k)^{-1} \Big[d_1 \eta_{11} \delta_{1k} + d_k R^{-2k} + \sigma_k \Big] - (\beta + a^{(2)}k)^{-1} a^{(2)}k \delta_{1k},$$

(k = 1, 2, ...) que también podemos escribir de la forma

$$0 = \left(a^{(1)} - \beta(\beta + a^{(2)}k)^{-1}a^{(2)}\right) \left[d_1\eta_{11}\delta_{1k} + \sigma_k + \delta_{1k}\right] - \left(a^{(1)} + \beta(\beta + a^{(2)}k)^{-1}a^{(2)}\right) d_k R^{-2k}.$$
(4-104)

Observación: Cuando $\beta \to \infty$ este sistema coincide con [144, Appendix] y [143, ec. (3.12)]. Otra forma de escribir (4-104) es

$$\beta_k \Big[\sum_{j=1}^{\infty} {}^o d_j \eta_{jk} + \delta_{1k} \Big] - d_k R^{-2k} = 0. \qquad (k = 1, 2, \dots)$$
(4-105)

donde

$$\beta_k = \frac{(1-\rho)\beta + a^{(2)}k}{(1+\rho)\beta + a^{(2)}k} \qquad \left(\rho = \frac{a^{(2)}}{a^{(1)}}\right),\tag{4-106}$$

coincidiendo con los resultados obtenidos en [142, ec. (24)] y [77, ec. (23)].

Resolver este sistema infinito de ecuaciones significa encontrar la solución de los problemas locales y por tanto, encontrar la fórmula analítica para los coeficientes efectivos. En la siguiente sección proponemos una forma de resolver dicho sistema.

4.3.2. Fórmulas analíticas aproximadas para el coeficiente efectivo

En esta sección se encontrarán aproximaciones a las soluciones del sistema infinito y los coeficientes efectivos asociados a dichas aproximaciones mediante truncamientos de orden finito.

Para calcular las propiedades efectivas (4-36) y (4-21) se utilizará la propiedad de isotropía:

$$\hat{a}_{ij} = \langle a_{ij} \rangle_W + \left\langle a_{ik} \frac{\partial N_j}{\partial \xi_k} \right\rangle_W$$

$$= \delta_{ij} \langle a \rangle_W + \left\langle a \frac{\partial N_j}{\partial \xi_i} \right\rangle_W.$$
(4-107)

Para \hat{a}_{11} podemos aplicar el teorema de Green y la parametrización en la interfaz para obtener

$$\left\langle a \frac{\partial N_1}{\partial \xi_1} \right\rangle_W = \int_{-\pi}^{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} {}^o \left(a^{(1)} \left[d_1 \eta_{11} \delta_{1k} - d_k R^{-2k} + \sigma_k + (1-\rho) \delta_{1k} \right] \right. \\ \left. - a^{(1)} \left[\eta_{11} \delta_{1k} + d_k R^{-2k} + \sigma_k \right] \right) R^k \cos(k\theta) R \cos\theta d\theta \\ = - \sum_{k=1}^{\infty} {}^o a^{(1)} \left[2 d_k R^{-2k} - (1-\rho) \delta_{1k} \right] R^{k+1} \int_{-\pi}^{\pi} \cos(k\theta) \cos\theta d\theta,$$

y como $\int_{-\pi}^{\pi} \cos(k\theta) \cos\theta d\theta = \pi \delta_{k1}$, se obtiene finalmente

$$\hat{a}_{11} = a^{(1)} - (a^{(1)} - a^{(2)})\pi R^2 + (a^{(1)} - a^{(2)})\pi R^2 - 2a^{(1)}\pi d_1$$

= $a^{(1)}(1 - 2\pi d_1).$ (4-108)

Siguiendo un procedimiento análogo se probó, además, que

$$\hat{a}_{12} = \hat{a}_{21} = 0, \tag{4-109}$$

$$\hat{a}_{22} = \hat{a}_{11}, \tag{4-110}$$

Lo anterior significa que no es necesario resolver todo el sistema infinito sino solamente encontrar la solución de la primera variable d_1 . Además, la matriz de coeficientes efectivos responde a un comportamiento isotrópico en el cual solo interesa un único coeficiente, por lo que en lo adelante emplearemos la notación

$$\hat{a} = \hat{a}_{11} = \hat{a}_{22},\tag{4-111}$$

para referirnos a dicho coeficiente.

La estrategia que se seguirá para resolverlo es conocida como método de reducción [151] y se basa en realizar truncamientos sucesivos del sistema. Existen diferentes formas de truncar un sistema infinito, por ejemplo en [152, 153] se reportan truncamientos lineales, triangular y cuadrado (nombres dados por la estructura de las matrices resultantes). Nosotros utilizaremos únicamente los de tipo cuadrado. La existencia de solución y la validez de esta técnica está garantizada en nuestro caso por tratarse de un sistema de tipo normal [151]. En el Apéndice C se enuncian algunos de estos resultados.

Utilizando estas técnicas es posible encontrar expresiones analíticas para los coeficientes

efectivos, dependientes de la concentración de las inclusiones

$$\phi = |Y_2| = \pi R^2.$$

Para truncamientos de orden pequeño es posible encontrar fórmulas para los coeficientes efectivos donde intervienen pocos términos, sin embargo, para el resto de truncamientos es conveniente utilizar el sistema en su forma matricial y resolverlo mediante métodos numéricos del álgebra lineal [154,155]. En este sentido, denotemos las siguientes matrices infinitas por

$$I = (\delta_{kk}), \qquad H = (\eta_{kl}), \qquad P = (\delta_{kk}R^k), \qquad B = (\delta_{kk}\beta_k),$$

y a los vectores infinitos por $d = (d_1, d_3, ...)^{\top}, e_1 \equiv (1, 0, 0, ...)^{\top}$. De esta forma, el sistema puede escribirse como

$$Md \equiv (I - BP^2H)d = v, \qquad (4-112)$$

donde $v = BP^2 e_1 = (\beta_1 R^2, 0, 0, ...)^\top$ y $BP^2 H = (\beta_k R^{2k} \eta_{kl})$ (la multiplicación se aplica de la forma usual por ser P y B matrices diagonales).

Observación: Es usual encontrar este sistema escrito en términos de una variable auxiliar $\tilde{d} = (Rd_1, \sqrt{3}R^3d_3, \dots, \sqrt{k}R^kd_k, \dots)^\top$. En dicho caso el sistema quedaría escrito como

$$(I - BW)\tilde{d} = v',\tag{4-113}$$

donde $W = (\sqrt{kl}\eta_{kl}R^{k+l})$ y $v' = BPe_1 = (\beta_1 R, 0, 0, \dots)^{\top}$.

4.3.2.1. Truncamiento de primer orden

Tomemos por ejemplo el truncamiento de (4-105) cuando tenemos solo una ecuación y la única incógnita d_1 :

$$\beta_1 \Big[d_1 \eta_{11} + 1 \Big] - d_1 R^{-2} = 0. \tag{4-114}$$

De aquí se tiene

$$d_1 = -\beta_1 (\beta_1 \eta_{11} - R^{-2})^{-1} = (R^{-2} \beta_1^{-1} - \eta_{11})^{-1}, \qquad (4-115)$$

donde

$$\beta_1 = \frac{(1-\rho)\beta + a^{(2)}}{(1+\rho)\beta + a^{(2)}}$$

En particular para una celda cuadrada, de (4-108), se obtiene

$$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \pi R^2 \beta_1}{1 + \pi R^2 \beta_1} = \frac{1 - \phi \beta_1}{1 + \phi \beta_1}.$$
(4-116)

Este resultado es de gran importancia pues coincide con los resultados clásicos de [156, ec. (11)] y [157, ec. (32), (42)], quienes los derivaron de forma independiente por métodos diferentes. En ambos casos, además, se plantea el problema para un esferoide y el resultado de la fibra es el caso límite cuando el eje mayor tiende al infinito.

Cuando $\beta \to \infty$:

$$\lim_{\beta \to \infty} \beta_1 = \lim_{\beta \to \infty} \beta_k = \frac{1 - \rho}{1 + \rho} = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)} + a^{(2)}}$$

y este resultado concuerda con [41, ec. (16)].

También son de interés los casos límite $a^{(2)} \in \{0, \infty\}$:

$$\lim_{a^{(2)} \to 0} \frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi}{1 + \phi} \qquad \lim_{a^{(2)} \to \infty} \frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 + \phi}{1 - \phi}.$$

estos casos corresponderían a medios cuyas inclusiones son vacías o superconductoras, respectivamente (Fig. 4-4)



Figura 4-4: Casos límites para fibras vacías $(a^{(2)} \rightarrow 0 \text{ azul})$ y superconductoras $(a^{(2)} \rightarrow \infty \text{ naranja})$.

4.3.2.2. Truncamiento de segundo orden

Tomando las dos primeras ecuaciones (con dos incógnitas) obtenemos el sistema

$$\beta_1 \Big[d_1 \eta_{11} + d_3 \eta_{31} + 1 \Big] - d_1 R^{-2} = 0, \qquad (4-117)$$

$$\beta_3 \left[d_1 \eta_{13} + d_3 \eta_{33} \right] - d_3 R^{-6} = 0.$$
(4-118)

Notemos que para una celda cuadrada S_{λ} es siempre un número real y desaparece cuando λ no es múltiplo de 4. Con esta información es posible calcular $\eta_{11} = -\pi, \eta_{31} = -3S_4, \eta_{13} = -S_4$ y $\eta_{33} = 0$, donde

$$S_4 = \frac{\Gamma\left(\frac{1}{4}\right)^8}{960\pi^2} \approx 3.1512120021538975\dots$$

De este sistema nos interesa solamente, para el cálculo de \hat{a} el valor de d_1 , podemos utilizar entonces la regla de Cramer, obteniéndose:

$$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi\beta_1 - 3S_4^2 \pi^{-4}\beta_1\beta_3\phi^4}{1 + \phi\beta_1 - 3S_4^2 \pi^{-4}\beta_1\beta_3\phi^4}.$$
(4-119)
4.3.2.3. Truncamientos de orden superior

Realizando un análisis similar para los truncamientos de tercer y cuarto órdenes se obtuvieron los siguientes resultados.

Para un truncamiento de **tercer orden** se obtiene el siguiente resultado para celdas cuadradas:

$$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi\beta_1 - 3S_4^2 \pi^{-4} \beta_1 \beta_3 \phi^4 / \Delta_1}{1 + \phi\beta_1 - 3S_4^2 \pi^{-4} \beta_1 \beta_3 \phi^4 / \Delta_1},\tag{4-120}$$

donde

$$\Delta_1 = 1 - 735 S_8^2 \pi^{-8} \beta_3 \beta_5 \phi^8,$$

у

$$S_8 = \frac{3}{7}S_4^2 \approx 4.2557730353651895\dots$$

Observación: Las similitudes en la estructura de (4-116), (4-119) y (4-120) no son casuales. Denotemos por Δ_{11} el (1, 1)-ésimo menor de la matriz M en (4-112) (el determinante de la matriz $(n-1) \times (n-1)$ formada mediante la eliminación de las primeras fila y columna de M). Por la regla de Cramer, y teniendo en cuenta que $M_{11} = (1 - \beta_1 R^2 \eta_{11})$, se tiene entonces que

$$d_1 = \frac{\beta_1 R^2 \Delta_{11}}{(1 - \beta_1 R^2 \eta_{11}) \Delta_{11} - T} = \left((R^{-2} \beta_1^{-1} - \eta_{11}) - T/(\beta_1 R^2 \Delta_{11}) \right)^{-1},$$

donde T es una suma de términos de orden no menor que R^2 . Esto es válido también para cualquier truncamiento de dicha matriz. De aquí que

$$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi\beta_1 - \tau}{1 + \phi\beta_1 - \tau},\tag{4-121}$$

donde τ es una suma ponderada de términos de orden no menor que ϕ^2 .

Por último veremos un truncamiento de cuarto orden. En este caso tenemos

$$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi\beta_1 - (C_4\beta_1\beta_3\phi^4 + C_8\beta_1\beta_7\phi^8\Delta_1')/\Delta_2}{1 + \phi\beta_1 - (C_4\beta_1\beta_3\phi^4 + C_8\beta_1\beta_7\phi^8\Delta_1')/\Delta_2},\tag{4-122}$$

donde

$$C_4 = 3S_4^2 \pi^{-4}, \quad C_8 = 7S_8^2 \pi^{-8},$$

$$\Delta_1'(\phi) = \Delta_1(\phi) - b_{12}\beta_5\beta_7 \phi^{12},$$

$$\Delta_2 = 1 - 735S_8^2 \pi^{-8}\beta_3\beta_5 \phi^8 - 66^2 \cdot 35S_{12}^2 \pi^{-12}\beta_5\beta_7 \phi^{12},$$

у

$$S_{12} = \frac{18}{143} S_4^3 \approx 3.9388490128279704\dots$$

La fórmula de cuarto orden (4-122) será utilizada en la Sección 6.2.2 para obtener el coeficiente efectivo mediante homogeneización convencional y reiterada. Se pueden encontrar fórmulas de orden superior a partir de este procedimiento, pero las actuales son suficientes para nuestro objetivo. De hecho se encontró una expresión para la de quinto orden de la forma

$$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi\beta_1 - (C_4\beta_1\beta_3\phi^4 + C_8\beta_1\beta_7\phi^8 + E_{16}\beta_1\beta_3\beta_5\beta_7\phi^{16} + E_{20}\beta_1\beta_3\beta_7\beta_9\phi^{20})/\Delta_3}{1 + \phi\beta_1 - (C_4\beta_1\beta_3\phi^4 + C_8\beta_1\beta_7\phi^8 + E_{16}\beta_1\beta_3\beta_5\beta_7\phi^{16} + E_{20}\beta_1\beta_3\beta_7\beta_9\phi^{20})/\Delta_3}.$$
 (4-123)

Los detalles sobre estas fórmulas se presentarán posteriormente en la tabla 4-2 (Sección 4.4.3).

4.4. Validación

El M.H.A. desarrollado permite el cálculo de coeficientes efectivos para medios conductivos a partir de la solución problemas locales. Para casos sencillos como laminados y fibras cilíndricas sección transversal circular se obtuvieron expresiones analíticas, exactas en el primero y aproximadas en el segundo.

A continuación se presentarán algunos aplicaciones directas de estas fórmulas para casos puntuales que nos permiten un mejor entendimiento del comportamiento global de este tipo de materiales compuestos. La influencia de los parámetros y la necesidad de considerar al menos dos escalas al modelar materiales con estructuras complejas se estudiará con más detalle en el Capítulo 6.

Aplicaremos los resultados 1D a nanofluidos, para lo cual se desarrollarán dos modelos extensibles a más dimensiones. Por otra parte las expresiones analíticas aproximadas obtenidas en el caso 2D presentan diferentes márgenes de error. Es por esto que validaremos las fórmulas (4-116),(4-119)-(4-123) con resultados conocidos de la literatura. En particular resultó de interés compararlas con las propuestas en [153] para medios trifásicos, pues como fue planteado en 2.1, se trata de una de las vías clásicas para modelar el contacto imperfecto.

4.4.1. Modelos laminados multiescala

A continuación utilizaremos el método descrito en las secciones anteriores en un medio con dos dos escalas microestructurales, pero concentrándonos en los resultados del caso unidimensional. Primero haremos la distinción de dos modelos cuyas escalas se ven de diferentes formas y una posible interpretación que conserva algunas de sus principales características independientemente de las dimensiones involucradas. Información adicional sobre su obtención, desarrollo y aplicaciones aparecen también en [53].

A continuación tomaremos dos modelos cuyas escalas se interpretan de diferentes formas. Los modelos que se propondrán a continuación son independientes del número de dimensiones por lo que los representaremos esquemáticamente como en la figura 4-5).

El primer caso (Modelo I) consiste en un medio heterodisperso bimodal periódico, es decir, las inclusiones tienen dos geometrías y tamaños diferentes (modos). Consideraremos que los períodos en cada modo son proporcionales, y luego definiremos las escalas a partir de la razón entre estos períodos. En este modelo, las inclusiones más grandes representarían los agregados, para los que consideraremos la misma conductividad que para una partícula aislada, y que han logrado formar una red regular.

El segundo caso (Modelo II) considerará un medio trifásico, donde la primera escala microscópica contiene los agregados y que estos, a su vez, son materiales compuestos. Es decir, en la microescala tenemos un fluido que contiene inclusiones compuestas formadas por una



Figura 4-5: Ejemplo en un caso bidimensional y sus modelos correspondientes (Modelo I a la izquierda, Modelo II a la derecha).

fase virtual que captura toda la información disponible a nanoescala de la fase dispersa y los aglomerados.

Por simplicidad, consideraremos el fluido como un medio homogéneo, las fases en la esfera estarán determinadas por el tamaño de los conglomerados (en inglés conocidos como *backbones*) y la propiedad efectiva del fluido considerando solo las inclusiones libres (en inglés conocidos como *deadends*) [49, 53]. Denotaremos por $a^{(1)}, a^{(nc)}, a^{(c)}$ y \hat{a} a la conductividad térmica del fluido base, de las partículas más pequeñas (que representa las inclusiones libres), de las partículas más grandes (que representa los conglomerados) y la conductividad térmica efectiva, respectivamente.

Estamos interesados en la mejora de la conductividad térmica (ganancia de propiedad) del nanofluido en comparación con la conductividad del fluido base: $\frac{\hat{a}}{a^{(1)}}$. Para ambos modelos se consideró una barrera térmica homogénea (números de Biot $B_1 = B_2 = B$). Las fórmulas que se presentarán a continuación se deducen a partir de las ecuaciones (4-71) y (4-74)(Sección 4.2).

4.4.1.1. Aplicación a nanofluidos

En el modelo **I**, las fracciones de volumen, o concentraciones, de las fases se puede representar mediante el esquema que se muestra en la Fig.4-6, donde $\Phi_a = 1 - \tilde{\Phi}_0$ es la concentración de las partículas más grandes, y $\Phi_{nc} = (1 - \tilde{\Phi}_a)\tilde{\Phi}_0$ la concentración de las más pequeñas. Un enfoque equivalente es estudiado en la literatura para el caso multidimensional en [49] considerando un contacto perfecto, y en el caso unidimensional en [135] para un contacto imperfecto.



Figura 4-6: Las regiones en negro representan la fracción de volumen ocupada por los conglomerados (parte derecha de $\tilde{\Phi}_0$ a 1), y las inclusiones libres (parte derecha de 0 a $\tilde{\Phi}_0$) y la región gris la fracción de volumen ocupada por la matriz.

Para el modelo I, las fórmulas de los coeficientes efectivos son

$$a_{11}^{1} = a_{33}^{1} = \begin{cases} \frac{(1 - \Phi_{p})a^{(1)} + (\Phi_{p} - \Phi_{0})a^{(c)}}{1 - \Phi_{0}}, & y < 1 - \Phi_{0}; \\ a^{(1)}, & y > 1 - \Phi_{0}; \end{cases}$$
(4-124)

$$a_{22}^{1} = \begin{cases} (1 - \Phi_{0}) \left(\frac{(1 - \Phi_{p})}{a^{(1)}} + \frac{(\Phi_{p} - \Phi_{0})}{a^{(c)}} + \frac{1}{B} \right)^{-1}, & y < 1 - \Phi_{0}; \\ a^{(1)}, & y > 1 - \Phi_{0}; \end{cases}$$
(4-125)

$$\hat{a}_{11} = \hat{a}_{33} = (1 - \Phi_p)a^{(1)} + \Phi_p a^{(c)}, \tag{4-126}$$

$$\hat{a}_{22} = \left(\frac{1-\Phi_p}{a^{(1)}} + \frac{\Phi_p}{a^{(c)}} + \frac{2-\Phi_0}{B}\right)^{-1}.$$
(4-127)

La forma volumétrica del modelo **II** representa, formalmente, un medio trifásico. Podemos interpretarlo como una simplificación del problema en cuestión calculando $a^{(nc)}$ de la conductividad de las fases restantes. En nuestro estudio consideraremos dos posibilidades: cuando el coeficiente $a^{(nc)}$ solo depende de $a^{(c)}$ y $a^{(1)}$ (pudiendo ser constante), y en el caso de que también dependa de Φ_0 .

Por otro lado, para el modelo II las fórmulas son

$$a_{11}^{1} = a_{33}^{1} = \begin{cases} (1 - \Phi_a)a^{(nc)} + \Phi_a a^{(c)}, & y < \Phi_0; \\ a^{(1)}, & y > \Phi_0; \end{cases}$$
(4-128)

$$a_{22}^{1} = \begin{cases} \left(\frac{(1-\Phi_{a})}{a^{(nc)}} + \frac{\Phi_{a}}{a^{(c)}} + \frac{1}{B}\right)^{-1}, & y < \Phi_{0}; \\ a^{(1)}, & y > \Phi_{0}; \end{cases}$$
(4-129)

$$\hat{a}_{11} = \hat{a}_{33} = (1 - \Phi_p)a^{(1)} + \Phi_p \Phi_a a^{(c)} + \Phi_p (1 - \Phi_a)a^{(nc)}, \qquad (4-130)$$

$$\hat{a}_{22} = \left(\frac{1-\Phi_p}{a^{(1)}} + \frac{\Phi_p \Phi_a}{a^{(c)}} + \frac{\Phi_p (1-\Phi_a)}{a^{(nc)}} + \frac{1+\Phi_0}{B}\right)^{-1}.$$
(4-131)

En ambos casos tanto $a^{(1)}$ como $a^{(c)}$ serían conocidas, sin embargo en el segundo modelo la conductividad efectiva sigue dependiendo de una nueva incógnita $a^{(nc)}$ que no es posible medir experimentalmente, por lo que se proponen establecer relaciones simples para su cálculo que permitan una comprensión más amplia de dicho modelo. De especial interés es la siguiente relación, conocida como modelo de Bruggeman, el cual es uno de los más utilizados en nanofluidos [26,29]:

$$(1 - \Phi_0)\frac{a^{(1)} - a^{(nc)}}{a^{(1)} + 2a^{(nc)}} + \Phi_0 \frac{a^{(c)} - a^{(nc)}}{a^{(1)} + 2a^{(nc)}} = 0,$$

o equivalentemente

$$a^{(nc)} = a^{(1)}(1 - \Phi_0) + a^{(c)}\Phi_0.$$

En [53] se proponen, además, un promedio simple y la media armónica:

$$a^{(nc)} = a^{(1)}(1 - \Phi_0)^{-1} + a^{(c)}\Phi_0^{-1}$$

Para el modelo **II**, en todas las relaciones propuestas se pudo verificar, además, que los coeficientes efectivos son proporcionales al número de Biot, por lo que se consideró una normalización del tipo

$$\hat{a}_{norm} = \frac{\frac{a}{a^{(1)}} - Inf}{Sup - Inf},\tag{4-132}$$

donde

$$Inf = \frac{Ba^{(1)}}{a^{(c)} + Ba^{(1)}}, \quad Sup = \frac{Ba^{(c)}}{2a^{(c)} + Ba^{(1)}}.$$

4.4.1.2. Comparación entre modelos:

La Figura 4-7 muestra los gráficos de ambos modelos. Observe que la normalización depende del número de Biot. Un resultado importante es que la normalización adoptada conduce a gráficos casi idénticos, excepto por la escala, para cada número Biot fijo. La línea $\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = 1$ no representa ninguna ganancia o pérdida en comparación con la matriz.

Aunque las inclusiones son más conductoras que la matriz, pequeñas concentraciones conducirán a conductividades efectivas más bajas que la matriz, en lugar de ganancia. Esto se debe al contacto imperfecto, y este efecto se vuelve más evidente para números de Biot más pequeños.



Figura 4-7: Comparación de los diferentes modelos: El gráfico (a) representa el modelo I para diferentes valores del número de Biot. Los gráficos (b), (c) y (d) representan el modelo II para diferentes formulaciones de $a^{(nc)}$ y varios valores de agregación α y contacto perfecto: (b) representa un caso estático, (c) el modelo de Bruggeman y (d) la media armónica. En todos los casos se tomó $\Phi_a = 0.35$.

Debido a la propiedad de normalización del modelo **II** se puede considerar que los resultados que de el se obtengan estarán acotados por los equivalentes para el modelo **I**. Retomaremos nuevamente la comparativa de ambos modelos para estudiar el fenómeno de Ganancia en el Capítulo 6. En el resto de este trabajo, siempre que no se especifique, utilizaremos para medios con escalas microestructurales múltiples un modelo de tipo **I**.

4.4.2. Validación en compuestos fibrosos

Diversas aproximaciones analíticas aparecen en la literatura provenientes de diferentes enfoques analíticos. En particular, considerando los efectos del contacto entre la fases, se encuentran trabajos basados en el enfoque analítico de Maxwell [153,156], en el de Bruggerman [158,159], entre otros [158,160]. Sabemos que las propiedades efectivas coinciden para concentraciones pequeñas de las inclusiones (inferiores a 0.4) independientemente del modelo de homogeneización escogido [160,161]. Sin embargo, para altas concentraciones, las diferencias son más notorias y los resultados experimentales difieren en diferente grado dependiendo de las características incorporadas. Resulta importante entonces entender cómo se relacionan los resultados propuestos con modelos conocidos y el comportamiento asintótico de las soluciones.

Como ya fue mencionado, el sistema (4-105) coincide con los obtenidos en [77, 142]. En la presente sección evaluaremos el comportamiento de los diferentes truncamientos propuestos en la sección 4.3 (ecuaciones (4-116),(4-119)-(4-123)), comparándolos con otros resultados presentes en la literatura.

En la figura 4-8 se presenta una comparación con los resultados experimentales de [162] considerando el parámetro adimensional de acoplamiento

$$c = \frac{1}{1+\beta}$$

Aquí c = 0 denotaría el contacto perfecto entre las fases y c = 1 la completa separación de fases en el compuesto.



Figura 4-8: Comparación de conductividades efectivas mediante el parámetro de acoplamiento, y resultados experimentales (puntos) [162]

En la literatura se encuentran desarrollos similares al nuestro para materiales elásticos. En la tabla 4-1 se compara con el módulo de cizalladura longitudinal efectivo (equivalente) para un arreglo de celdas cuadradas.

Con el objetivo de cuantificar el error de las diferentes aproximaciones estas fueron comparadas con la de quinto orden, para diferentes números de Biot y tomando $\rho \in \{2, 50\}$ como valores representativos. Las mayores diferencia entre estas aproximaciones se manifestó para el

Tabla 4-1: Comparación para fracción de volumen de fibra vacía ($\rho = 10^{-5}/30$) usando las fórmulas obtenidas y resultados publicados en [142, 153, 163]

ϕ	Ec.(4-116)	Ec.(4-119)	Ec.(4-120)	Ec.(4-122)	[153]*	[142]**	[163]***	
0.1	0.818182	0.818177	0.818177	0.818177	0.818177	0.818177	0.818177	
0.2	0.666667	0.666531	0.666531	0.666531	0.666531	0.666530	0.666530	
0.3	0.538462	0.537580	0.537580	0.537580	0.537580	0.537580	0.537580	
0.4	0.428572	0.425358	0.425355	0.425351	0.425351	0.425350	0.425350	
0.5	0.333333	0.324729	0.324681	0.324655	0.324655	0.324654	0.324653	
0.6	0.25	0.230949	0.230477	0.230329	0.230322	0.230318	0.23032	
* Tabla 1, fórmula de 6to orden de [153]								
** Tabla 3, de [142]								
*** Tabla 7, de [163]								

contacto perfecto (Fig. 4-9), siendo más notorias para ρ altos aumentando no solo su magnitud, sino que comienzan a diverger para concentraciones menores.



Figura 4-9: Comparación de los errores con contacto perfecto. Se consideraron $\rho = 2$ (izquierda) y $\rho = 50$ (derecha) como valores representativos. Las curvas marcadas con el símbolo (*) se obtuvieron con las fórmulas de [153] en lugar de las nuestras.

En la figura 4-10 se presentan, además, algunos de los valores de la literatura [78, 142] junto a las aproximaciones analíticas propuestas (ecuaciones (4-116), (4-119)-(4-123)) en un intervalo



cercano a la percolación. Se puede observar que con nuestra propuesta se alcanzan precisiones similares utilizando truncamientos de menor orden.

Figura 4-10: Comparación de conductividades efectivas para fracciones de volumen altas, $\rho \in \{2, 50\}$ y diferentes números de Biot. Para el cálculo de las curvas marcadas con el símbolo (*) se utilizaron las fórmulas de [153] en lugar de las nuestras.

Para analizar los órdenes de aproximación obtenidos en (4-116) y (4-119)-(4-123) se tendrán en cuenta sus desarrollos en series de Laurent alrededor de $\phi = 0$. Para (4-116) dicho desarrollo es sencillo de obtener:

$$\frac{1-\phi\beta_1}{1+\phi\beta_1} = 1 + 2\sum_{j=1}^{\infty} \left(-\beta_1\phi\right)^j.$$
(4-133)

La complejidad de estos desarrollos aumenta a medida que el truncamiento es de orden mayor, no obstante, fue posible obtener una expresión hasta el octavo término la cual es cierta para todos los truncamientos de orden superior. Es decir, para las fórmulas (4-119)-(4-123) se cumple:

$$\frac{\hat{a}_{11}}{a^{(1)}} = 1 + 2\sum_{j=1}^{4} (-\beta_1 \phi)^j
+ 2\sum_{j=1}^{4} \left((-\beta_1)^{4+j} - 3jS_4^2 \pi^{-4} (-\beta_1)^{j+1} \beta_3 \right) \phi^{4+j}
+ o(\phi^9).$$
(4-134)

En particular, tanto el desarrollo en serie de Laurent de (4-122) y (4-123) como los de las fórmulas de cuarto y sexto orden propuestas en [153] (Tabla 4-2) coinciden hasta el orden 12, y tienen la forma:

$$\frac{\hat{a}_{11}}{a^{(1)}} = 1 + 2\sum_{j=1}^{12} (-\beta_1)^j \phi^j - 2\sum_{j=1}^8 \left(3jS_4^2 \pi^{-4} (-\beta_1)^{j+1} \beta_3\right) \phi^{4+j}
+ 2\sum_{j=1}^4 \left(9\frac{j(j+1)}{2}S_4^4 \pi^{-8} (-\beta_1)^{j+2} \beta_3^2 - 7jS_8^2 \pi^{-8} (-\beta_1)^{j+1} \beta_7\right) \phi^{8+j}
+ o(\phi^{13}).$$
(4-135)

Observación: El desarrollo anterior coincide con [164] en el contexto de contacto perfecto, es decir, cuando

$$\lim_{\beta \to \infty} \beta_k = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)} + a^{(2)}},$$

obteniéndose

$$\begin{aligned} \frac{\hat{a}_{11}}{a^{(1)}} &= 1 + 2\sum_{j=1}^{12} (-\chi)^j \,\phi^j + 2\sum_{j=1}^8 \left(3jS_4^2 \pi^{-4} \,(-\chi)^{j+2}\right) \phi^{4+j} \\ &+ 2\sum_{j=1}^4 \left(9\frac{j(j+1)}{2}S_4^4 \pi^{-8} \,(-\chi)^{j+4} + 7jS_8^2 \pi^{-8} \,(-\chi)^{j+2}\right) \phi^{8+j} \\ &+ O(\phi^{13}), \end{aligned} \tag{4-136}$$

donde

$$\chi = \frac{a^{(1)} - a^{(2)}}{a^{(1)} + a^{(2)}}.$$

Además, este desarrollo solo difiere del de (4-120) en

$$7jS_8^2\pi^{-8}(\chi)^3 + o(\phi^9).$$

Las aproximaciones (4-134)-(4-135) brindan un indicio de qué tan parecidas son todas estas aproximaciones, especialmente para ϕ pequeños. Por ejemplo, si $\phi < 0.32$ y $\rho < 100$, las aproximaciones de orden superior a 2 son indistinguibles con precisiones menores de 4 cifras decimales.

4.4.3. Comparación del caso bidimensional con un medio trifásico

En la literatura existen diferentes formas de modelar el contacto imperfecto. Hasta el momento se ha considerado que dicha imperfección se encuentra en una superficie que separa dos fases, una formada por la matriz y otra formada por las inclusiones. Otro modelo, que analizaremos a continuación, se basa en considerar que el medio está constituido por tres fases, las antes mencionadas y una tercera (mesofase o buffer) que separa a ambas, con sus propias características y propiedades. De esta forma, cuando el espesor de la capa intermedia es muy fino ambos modelos deberían ser equivalentes (Fig. 4-11).



Figura 4-11: Sección transversal de nuestro modelo y de un medio trifásico equivalente.

Para este segundo modelo se presentan dos dificultades principales: (1) Desde el punto de vista teórico, cómo garantizar la equivalencia de ambas en el límite (existencia de dicho límite, que los problemas están bien planteados). (2) Desde el punto de vista práctico, que los métodos numéricos converjan al valor correcto cuando las dimensiones de la capa son muy pequeños (discretizaciones, aliasing y otros artefactos numéricos).

En la presente sección compararemos los resultados analíticos de [153] para un modelo trifásico con los nuestros. De esta manera, para pequeños espesores podemos validar nuestros resultados y buscar condiciones que garanticen la equivalencia de ambos modelos, al menos en los casos límite cuando el espesor tiende a cero.

Denotaremos por

$$a(y) = \begin{cases} a^{(1)}, & y \in Y_1 \quad (\text{matriz}), \\ a^{(\Gamma)}, & y \in Y_{\Gamma} \quad (\text{interfaz}), \\ a^{(2)}, & y \in Y_2 \quad (\text{inclusion}). \end{cases}$$

Hipótesis: Los desarrollos que se realizarán a continuación suponen que existe una cierta constante C(r) tal que, para los modelos presentados, exista el límite:

$$\lim_{\delta \to 0} \frac{a^{(\Gamma)}}{\delta \beta} = C(r).$$
(4-137)

En [153] se obtienen aproximaciones de la propiedad efectiva del modelo trifásico (isotrópico) similar en forma a (4-121). En su caso las aproximaciones tienen la forma:

$$F_{\text{cond}} \equiv \frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi v_1 - terms}{1 + \phi v_1 - terms} = 1 - \frac{2\phi v_1}{1 + \phi v_1 - terms},$$
(4-138)

donde terms es una suma ponderada de términos de ϕ cuyos coeficientes se calculan utilizando las siguientes expresiones:

$$v_k = \frac{\chi_o + \chi_i \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}}{1 + \chi_o \chi_i \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}},\tag{4-139}$$

donde

$$r_i = R - \frac{\delta}{2}, \quad r_0 = R + \frac{\delta}{2}, \quad \chi_o = \frac{a^{(1)} - a^{(\Gamma)}}{a^{(1)} + a^{(\Gamma)}}, \quad \chi_i = \frac{a^{(\Gamma)} - a^{(2)}}{a^{(\Gamma)} + a^{(2)}}.$$

Nuestra intención es encontrar la relación que existe entre v_k y β_k a partir de (4-106) y (4-139), para $\delta \ll 1$.

Reescribamos

$$\begin{split} v_k &= \frac{(a^{(1)} - a^{(\Gamma)})(a^{(\Gamma)} + a^{(2)}) + (a^{(1)} + a^{(\Gamma)})(a^{(\Gamma)} - a^{(2)})\left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}}{(a^{(1)} + a^{(\Gamma)})(a^{(\Gamma)} + a^{(2)}) + (a^{(1)} - a^{(\Gamma)})(a^{(\Gamma)} - a^{(2)})\left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}} \\ &= \frac{2(1 - \rho)a^{(\Gamma)} + (1 + a^{(\Gamma)}/a^{(1)})(a^{(2)} - a^{(\Gamma)})\left(1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}\right)}{2(1 + \rho)a^{(\Gamma)} + (1 - a^{(\Gamma)}/a^{(1)})(a^{(2)} - a^{(\Gamma)})\left(1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}\right)} \\ &= \frac{2(1 - \rho)a^{(\Gamma)} + a^{(2)}\left(1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}\right) - a^{(\Gamma)}A_n^-}{2(1 + \rho)a^{(\Gamma)} + a^{(2)}\left(1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}\right) - a^{(\Gamma)}A_n^-}, \end{split}$$

donde

$$A_n^- = \left(1 - \frac{a^{(2)} - a^{(\Gamma)}}{a^{(1)}}\right) \left(1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}\right),$$
$$A_n^+ = \left(1 + \frac{a^{(2)} - a^{(\Gamma)}}{a^{(1)}}\right) \left(1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k}\right).$$

Las v_k se pueden escribir convenientemente de forma explícita en términos de δ . Como

$$\frac{r_i}{r_o} = 1 - \frac{\delta}{r + \delta/2},$$

por lo tanto

$$1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k} = \frac{\delta}{r + \delta/2} \delta \sum_{j=1}^{2k} (-1)^{j-1} \binom{2k}{j} \left(\frac{\delta}{r + \delta/2}\right)^{j-1}$$

Considerando el polinomio

$$p_k(x) = \sum_{j=1}^{2k} (-1)^{j-1} \binom{2k}{j} x^{j-1},$$

podemos reescribir

$$1 - \left(\frac{r_i}{r_o}\right)^{2k} = \frac{\delta}{r + \delta/2} \left(2k + \frac{\delta}{r + \delta/2} p_k\left(\frac{\delta}{r + \delta/2}\right)\right).$$
(4-140)

Obteniéndose de esta forma los límites

$$\lim_{\delta \to 0} v_1 = \frac{(1-\rho)rC(r)\beta + ka^{(2)}}{(1+\rho)rC(r)\beta + ka^{(2)}}.$$
(4-141)

Esto quiere decir que, con la normalización

$$a^{(\Gamma)} = \frac{\delta\beta}{r} \tag{4-142}$$

es posible establecer un paralelismo entre nuestro modelo y el modelo trifásico propuesto por [153] para $\delta \ll 1$, siendo:

$$\beta_k = \lim_{\delta \to 0} v_k$$

Esta normalización (4-142) coincide, además, con las propuestas en [69, 142, 165].

Observación: En otras palabras, fijado un espesor δ suficientemente pequeño, si se conoce β en nuestro modelo es posible calcular un $a^{(\Gamma)} = \frac{\delta\beta}{r}$ para el cual el modelo trifásico es equivalente, y viceversa (encontrar β conociendo $a^{(\Gamma)}$).

Desde el punto de vista numérico, las aproximaciones aquí obtenidas coinciden razonablemente con los resultados presentados en [153]. De hecho los términos acompañantes en (4-138) coinciden para el primer y segundo truncamiento del sistema (ecuaciones (4-116) y (4-119) respectivamente). Para truncamientos de tercer orden comienzan a verse ciertas diferencias entre ambas aproximaciones. Mientras [153] propone la misma aproximación del orden anterior, en nuestro caso se obtuvo (4-120), cuyo denominador no aparece en las aproximaciones propuestas por [153] sino hasta el truncamiento de cuarto orden. En el cuarto orden ambas aproximaciones difieren aún más, y no puede establecerse un paralelismo exacto con sus resultados. La Tabla 4-2 presenta un resumen de esta comparativa.

A pesar de toda la potencialidad de los modelos presentados, las geometrías abordables por métodos analíticos siguen siendo muy limitadas. Para el cálculo de coeficientes efectivos de estructuras más complejas sigue siendo necesario el empleo de métodos numéricos. Esta temática será abordada en el capítulo siguiente a través del Método de los Elementos Finitos.

Orden	Ecs.(4-116),(4-119)-(4-123)	Manteufel-Todreas [153]	Coeficientes y funciones auxiliares				
Trunc.	$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi\beta_1 - \tau}{1 + \phi\beta_1 - \tau}$	$\frac{\hat{a}}{a^{(1)}} = \frac{1 - \phi v_1 - \tau}{1 + \phi v_1 - \tau}$					
1°	$\tau = 0$	$\tau = 0$					
2°	$\tau = C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4$	$\tau = C_4 v_1 v_3 \phi^4$	$C_4 = 3S_4^2 \pi^{-4} \approx 0.305827833$				
3º	$\tau = C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 / \Delta_1(\phi)$		$\Delta_1(\phi) = 1 - b_8 \beta_3 \beta_5 \phi^8$				
			$b_8 = 735 S_8^2 \pi^{-8} \approx 1.40295995$				
4°	$\tau = C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^* / \Delta_2(\phi)$	$\tau = C_4 v_1 v_3 \phi^4 / D_1(\phi)$	$C_8 = 7S_8^2 \pi^{-8} \approx 0.013361523$				
	$+ C_8 \beta_1 \beta_7 \phi^8 \frac{\Delta_1(\phi)}{\Delta_2(\phi)}$	$+ C_8 v_1 v_7 \phi^\circ$	$\begin{vmatrix} D_1(\psi) = 1 - b_8 v_3 v_5 \psi^* \\ \Delta_2(\phi) = 1 - \frac{5041}{122} b_8 \beta_3 \beta_5 \phi^8 \end{vmatrix}$				
			$\frac{13^2}{\Delta_1'(\phi)} = \Delta_1(\phi) - b_{12}\beta_5\beta_7\phi^{12}$				
			$b_{12} = 152460 S_{12}^2 \pi^{-12} \approx 2.55915216$				
	$\tau = \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg) \bigg) \bigg) \bigg) \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) \bigg) \bigg) \bigg) \bigg(C_4 \beta_1 \beta_3 \phi^4 - \frac{1}{\Delta_3(\phi)} \bigg) $		$E_{16} = 105(7S_8^2 - 66S_4S_{12})^2\pi^{-16}$				
5°	$+C_8\beta_1\beta_7\phi^8$		≈ 0.55915375				
	$+ E_{16}\beta_1\beta_3\beta_5\beta_7\phi^{16}$		$E_{20} = 63525(S_8S_{12} - 39S_4S_{16})^2 \pi^{-20}$ \$\approx 1.64640971\$				
	$+ E_{20}\beta_1\beta_3\beta_7\beta_9\phi^{20}\Big)$		$\Delta_3(\phi) = \Delta_2(\phi) - b_{12}'\beta_3\beta_9\phi^{12}$				
			$- b_{16}\beta_7\beta_9\phi^{16} - C_{24}\beta_3\beta_5\beta_7\beta_9\phi^{24}$				
			$b_{12}' = \frac{5}{84} b_{12} \approx 0.15233049$				
			$b_{16} = 32207175S_{16}^2 \pi^{-16} \approx 5.76867559$				
			$C_{24} = 2858625(22S_{12} - 91S_{16}S_8)^{-}\pi^{-1}$ ≈ 4.93057350				
$6^{\circ}\&7^{\circ}$		$\tau = C_4 v_1 v_3 \phi^4 / D_2(\phi)$	$C_{12} \approx 0.000184643; C_{16} \approx 0.242252;$ $C_{22} \approx 0.0241042; C_{22} \approx 0.0470721;$				
		$+ C_8 v_1 v_7 \phi^8$	$D_0(\phi) = 1 - b_{12}v_5v_7\phi^{12},$				
		$+ C_{12}(v_1)^2 \phi^{12}$	$D_2(\phi) = 1 - b_8 v_3 v_5 \phi^8 / D_0(\phi)$				
		$+ C_{16}v_1v_3v_5v_7\phi^{16}/D_3(\phi)$	$-b_{12}'v_3v_9\phi^{12}$				
		$+ C_{20}v_1v_5(v_7)^2\phi^{20}/D_0(\phi)$	$D_3(\phi) = 1 - b_8 v_3 v_5 \phi^8 / D_0(\phi)$				
		$+ C_{28}v_1v_3(v_5)^2(v_7)^2\phi^{23}/D_4(\phi)$	$-\left\lfloor b_{12}v_5v_7+b_{12}'v_3v_9 ight floor\phi^{12}$				
			$+ b_{20}v_3 (v_5)^2 v_7 \phi^{20} / D_0(\phi)$				
			$+ b_{24} v_3 v_5 v_7 v_9 \phi^{24}$				
			$D_4(\phi) = 1 - b_8 v_3 v_5 \phi^8 / D_0(\phi)$				
			$-[2b_{12}v_5v_7+b_{12}'v_3v_9]\phi^{12}$				
			$+ 2b_{20}v_3(v_5)^2v_7\phi^{20}/D_0(\phi)$				
			$+ [2b_{24}v_{3}v_{5}v_{7}v_{9}$				
			$+b_{24}(v_5)^2(v_7)^2]\phi^{2\pi}$				
			$-b_{32}v_{3}(v_{5})^{\circ}(v_{7})^{\circ}\phi^{\circ 2}/D_{0}(\phi)$				
$-b_{36}v_3(v_5)^2(v_7)^2v_9\phi^{00}$							
Donde: $b_{20} = 3.59039, b_{24} = 0.389837, b'_{24} = \frac{84}{5}b_{24}, b_{32} = 9.18835, b_{36} = 0.997652$							

Tabla 4-2: Comparación entre las aproximaciones propuestas por $\left[153\right]$ y las obtenidas en el presente trabajo.

Capítulo 5

Método de los elementos finitos

En este Capítulo se propone la resolución directa de los Problemas Locales mediante el Método de los Elementos Finitos, plantearemos sus elementos principales y una técnica conocidad como Método de Descomposición de Dominio que permitirá abordar el problema del contacto imperfecto. Abordaremos también brevemente algunas cuestiones relacionadas con su implementación computacional.

5.1. Homogeneización y Elementos Finitos

Los modelos matemáticos que resultan de la homogeneización requieren de la solución de problemas de contorno para ecuaciones diferenciales parciales. La solución analítica de tales problemas solo puede alcanzarse para geometrías particulares de las inclusiones o la celda periódica [143,144,166,167]. Sin embargo, para geometrías arbitrarias, es necesario aplicar métodos numéricos para resolver los Problemas Locales.

El Método de los Elementos Finitos (FEM, por sus siglas en inglés) es para nuestro caso un excelente candidato debido a su versatilidad, permitiendo introducir dominios de cálculo complejos y condiciones en regiones restringidas. Por ejemplo, en [50] FEM se combina con la Homogeneización Reiterada para investigar el comportamiento macroscópico de los problemas de transferencia de calor en compuestos 2D considerando un contacto térmico perfecto a través de las interfaces. Otra ventaja de este método es su generalidad, que permite aplicarlo a problemas elásticos, de transmisión de calor, mecánica de fluidos computacional, campos electromagnéticos, ecuación de Schrödinger, etc. [123, 168, 169].

El FEM permite obtener una solución numérica aproximada de las ecuaciones diferenciales en forma débil o ecuaciones integrales, que caracterizan el comportamiento físico del problema dividiéndolo en un número finito de subdominios en los cuales se obtendrá la solución. Esta estructura permite establecer relaciones de adyacencia o conectividad de modo que la solución aproximada en cada uno de ellos dependerá solamente de la solución en los subdominios más cercanos. En general dicha aproximación de la solución se reduce a resolver un sistema de ecuaciones lineales de gran dimensión por métodos generales del cálculo numérico.

5.2. Base teórica del Método de Elementos Finitos

En el Capítulo 2 hemos visto que las soluciones de un problema de contorno puede formularse en una forma fuerte (Sec. 2.2) y una forma débil (Sec. 2.3). Las segundas habitan en espacios de Hilbert de dimensión infinita, que llamaremos genéricamente H, donde debemos buscarlas o construirlas. La idea básica del FEM consiste en aproximar estos espacios por algunos espacios apropiados de dimensión finita H^h , de modo que se cumplan las siguientes condiciones

- 1. $H^h \subset H$, de dimensión finita.
- 2. Se escribe la solución u^h como combinación lineal de las funciones base del espacio H^h , de esta forma podemos formular y resolver el problema variacional en H^h .
- 3. Cuando $h \to 0$, $H^h \to H$, en otras palabras, $\lim_{h \to 0} ||u u^h|| = 0$, con u la solución débil del problema variacional en el espacio $H \neq u^h$ la solución del problema variacional en H^h .

Se hace evidente que en el centro de esta metodología está la selección de la base de dichos espacios de dimensión finita H^h , o mejor dicho, la construcción de un conjunto de funciones tales que el espacio generado por ellas cumpla con dichas características. En este sentido podemos ver al FEM como un caso particular del método de residuos ponderados de Bubnov-Galerkin o una forma sistemática de construir el espacio de funciones para el método de Rayleigh-Ritz, visto en la Sección 3.4. Algunos autores también lo relacionan con el método de mínimos cuadrados y establecen paralelismos entre FEM y el Métodos de Diferencias Finitas [123].

Una importante propiedad del método es la convergencia. De modo que si se consideran particiones de elementos finitos sucesivamente más finas, la solución numérica calculada converge rápidamente hacia la solución exacta del sistema de ecuaciones [107].

5.2.1. Elementos, nodos y funciones de forma

Al paso que traslada el análisis del nivel de cada elemento finito como una única entidad hacia el análisis de todo el grupo o conjunto que forman se le conoce como ensamblaje. Se puede decir que se resuelve de forma aproximada un problema complejo, en general sin solución analítica, a través de la resolución secuencial y estructurada de varios problemas más simples y con solución analítica [170].

Supongamos que se necesita resolver un problema de contorno en su formulación débil definido sobre un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ con una frontera continua en el sentido de Lipschitz. Una partición en *n elementos finitos*, es una colección de *n* subdominios $\{\mathcal{E}^{(i)}\}_{i=1}^n$ con interior disjunto compactos con frontera Lipschitz-continua cuya unión forma todo el dominio. Usualmente, por conveniencia práctica y sencillez de análisis, se considera que todos los elementos finitos son homeomorfo a un dominio de referencia $\hat{\mathcal{E}}$, es decir, para cada elemento existe una función continua $F^{(e)}: \hat{\mathcal{E}} \to \mathcal{E}^{(e)}$. Este dominio de referencia se suele llamar frecuentemente también *dominio isoparamétrico*. Consideraremos para nuestro estudio particiones en elementos isoparamétricos poligonales.

Sobre cada elemento se considerarán algunos puntos especiales llamados $nodos (nod(\mathcal{E}^{(k)}) \subset \mathcal{E}^{(k)})$, y que generalmente incluirán los vértices del elemento finito, para los cuales se requerirá la condición adicional de que dos elementos adyacentes compartan los nodos sobre sus fronteras

comunes, es decir:

$$\mathcal{E}^{(j)} \cap \operatorname{nod}(\mathcal{E}^{(i)}) \subset \operatorname{nod}(\mathcal{E}^{(j)}) \qquad \forall i, j = 1, \dots, n$$

En el caso isoparamétrico se puede establecer un sistema de coordenadas en $\hat{\mathcal{E}}$ de forma tal que la geometría de un elemento queda completamente definida a partir de los nodos que la componen.

El conjunto de nodos y elementos constituye lo que se conoce como mallado o malla de elementos finitos. Una vez definida la malla de elementos finitos, se define sobre cada elemento un espacio funcional de dimensión finita, usualmente formado por polinomios. Este espacio funcional servirá para aproximar localmente la solución del problema variacional (en nuestro caso (2-14)) y en lugar de la solución exacta se calculará la proyección de la solución original sobre dicho subespacio.

Existen muchas formas de elegir un conjunto de funciones que formen una base vectorial sobre la cual aproximar la solución exacta del problema en cada elemento. En particular, se buscan funciones que estén perfectamente definidas a partir de sus valores (o de sus derivadas) en los nodos. Nosotros definiremos un espacio vectorial \hat{X} de dimensión finita sobre el dominio de referencia $\hat{\mathcal{E}}$. Entonces mediante el homeomorfismo $F^{(e)}$ se define el espacio vectorial que servirá para aproximar la solución

$$V^{h} = \left\{ v^{h} \in V | \forall e : v^{h} \circ F^{(e)} \in \hat{X} \right\}.$$

A las funciones de la base de \hat{X} se le denomina funciones de forma.

El espacio más usual $\hat{X} = P_m(\hat{\mathcal{E}})$ es el que está formado por todos los polinomios de grado igual o inferior a *m*. Haciendo coincidir el número de nodos de cada elemento con el grado del espacio se pueden definir las funciones de forma, tales que

$$\hat{N}_i(\xi_j) = egin{cases} 1 & i=j \ 0 & i
eq j, \end{cases} \quad i,j\in \mathrm{nod}(\hat{\mathcal{E}}).$$

Esta definición permite proyectar sobre el espacio de elementos finitos cualquier función definida sobre el dominio original mediante la función de proyección

$$\left(\Pi^{h}v\right)(\cdot) = \sum_{i=1}^{m} v\left(x_{i}\right) N_{i}(\cdot) \in V^{h},$$
(5-1)

es decir, la aproximación funcional en $\hat{X} = P_m(\hat{\mathcal{E}})$ con esta base, coincide con la aproximación puntual en los nodos.

5.2.2. Procedimiento de FEM

Como hemos visto, para aplicar FEM se parte de un problema variacional, por lo que para resolver ecuaciones diferenciales de la mecánica de medios continuos es necesario escribirlas en su forma débil (Sec. 2.3). Los algoritmos que emplean FEM suelen dividirse en tres etapas, que describiremos a continuación.

Para la solución aproximada del problema es necesario hacer consideraciones adicionales: primeramente es necesario definir la malla y seleccionar la base, luego discretizar todos los parámetros y funciones que intervienen en las ecuaciones (propiedades de material, fuerzas, etc.). El cálculo de integrales también se realiza, salvo pocas excepciones, utilizando métodos aproximados de cuadratura. A esa parte de los algoritmos del FEM, unido a acciones destinadas a optimizar y evitar errores de cómputo (regularización y precondicionamiento) se le conoce como preprocesamiento.

El resultado del preprocesamiento es un sistema lineal de N ecuaciones y N incógnitas. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos, por lo que es común que se trate de sistemas muy grandes que requieren métodos especiales de resolución. Las incógnitas son las $v_i = v(x_i)$ que se obtienen cuando se sustituye (5-1) en el problema variacional. Cuando el problema a tratar es un problema no lineal o un problema dependiente del tiempo a veces el cálculo consiste en una sucesión finita de estos sistemas, que deben resolverse uno a continuación de otro, y cuya entrada depende del resultado del paso anterior.

En cualquier caso, el sistema anterior puede ser resuelto con cualquier algoritmo para la resolución de sistemas de ecuaciones lineales. Debido a que cada elemento está conectado a muy pocos elementos, la matriz final es dispersa (usualmente *definida por bandas*) y es por esto que se suelen emplear algoritmos eficientes en este tipo de sistemas de ecuaciones lineales [155]. Esta etapa es conocida como *cómputo lineal*, o simplemente *cómputo*.

La solución del sistema son los valores en los nodos, y utilizando las funciones de base se obtienen las soluciones aproximadas del problema variacional. De esta forma se calculan también otras magnitudes de interés, en ocasiones se aplican operaciones de suavizado e interpolación, y se pueden determinar cotas para los errores de aproximación. A esta última etapa se le llama postprocesamiento.

5.3. Método de Descomposición de Dominio

Cuando existe una zona de transición sobre la superficie de contacto de dos componentes del material compuesto, o cuando se produce la difusión, se dice que existe un contacto imperfecto en dicha interfaz (véase Sec. 2.1). Con mucha frecuencia esta zona no es tenida en cuenta en las investigaciones pues las propiedades del material en esta zona no se conocen suficientemente [78,82,86,113]. Sin embargo, existe un interés creciente en la influencia del contacto imperfecto, objeto de nuestro estudio. En [113, 114, 122] se encuentran cotas variacionales y soluciones analíticas para geometrías simples respectivamente. El método que veremos a continuación, junto con FEM, conduce a la solución de problemas muy complejos resolviendo problemas más simples en dominios separados.

En general el Método de Descomposición de Dominio (DDM, por sus siglas en inglés) consiste en sustituir la resolución de un sistema lineal por un proceso iterativo que resuelve (posiblemente en paralelo) varios sistemas más pequeños en dominios separados [171–173]. Este método ha resultado eficiente, en particular, para el caso de contacto imperfecto debido a la caracterización natural de los dominios y a la capacidad de gestionar diferentes condiciones de contacto en dicha interfaz. En [174] se utilizó la combinación de FEM y DDM para obtener los coeficientes efectivos considerando contacto imperfecto. De hecho, esta técnica se combina con el método de homogeneización asintótica (M.H.A.) en [171] para calcular los coeficientes efectivos de un compuesto fibroso conductor periódico con una barrera térmica en la interfaz entre la matriz y las fibras de sección transversal elíptica. Otra de las posibles ventajas de este método es su facilidad para la paralelización, que aunque está fuera del alcance del presente trabajo, no se descarta para futuras investigaciones.

La principal dificultad en los diferentes DDMs es la transmisión de la información entre los subdominios. En este sentido existen dos grupos: los que se basan en una partición en regiones disjuntas [171, 173, 174], y en una partición con recubrimiento [172, 175]. El método que emplearemos pertenece a la primera categoría, usando un esquema iterativo de Schwarz para el cual la relación entre las soluciones en los subdominios se expresa mediante condiciones apropiadas en la interfaz, la cual se considera una frontera común a ambos subdominios.

En términos generales, los Problemas Locales (4-15)-(4-18) y (4-28)-(4-31) buscan encontrar una solución U en un dominio $W \in \{Y, Z\}$, que sea W-periódica tal que:

- $\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}(\nabla \mathbf{U} + \mathbf{I})) = 0, \qquad \text{en } W \backslash \Gamma, \qquad (5-2)$
- $[\sigma_1 \left(\nabla \mathbf{U}_1 + \mathbf{I} \right)] \cdot \mathbf{n} = -\beta \llbracket \mathbf{U} \rrbracket, \text{ sobre } \Gamma,$ (5-3)
- $\llbracket \boldsymbol{\sigma} (\nabla \mathbf{U} + \mathbf{I}) \rrbracket \cdot \mathbf{n} = 0, \qquad \text{sobre } \Gamma, \qquad (5-4)$
 - $\langle \mathbf{U} \rangle_W = 0. \tag{5-5}$

Sea $W = W_1 \cup W_2$, donde W_1 y W_2 representan la matriz e inclusión, respectivamente. Definiremos $\mathbf{U}_{\alpha} = \mathbf{1}_{W_{\alpha}} \mathbf{U}$ ($\alpha = 1, 2$), y por simplicidad, consideraremos que las inclusiones son interiores y no tocan las fronteras exteriores ($\partial W_2 \cap \partial W = \emptyset$). Con esta notación, la ecuación (5-2) se puede descomponer en

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{\alpha}(\nabla \mathbf{U}_{\alpha} + \mathbf{I})) = 0 \quad \text{en } W_{\alpha}, \qquad (\alpha = 1, 2).$$

Por otra parte (5-3) y (5-4) son lo mismo que

$$[\boldsymbol{\sigma}_1(\nabla \mathbf{U}_1 + \mathbf{I})] \cdot \mathbf{n} = [\boldsymbol{\sigma}_2(\nabla \mathbf{U}_2 + \mathbf{I})] \cdot \mathbf{n} = -\beta(\mathbf{U}_2 - \mathbf{U}_1), \text{ sobre } \Gamma.$$

La condición (5-5) es requerida para nuestro problema solo por unicidad, otra variante sería tomar cualquier

$$\mathbf{U}' = \mathbf{U} + C$$

con C constante. En particular, una vez conocida U' que satisfaga (5-2)-(5-4): $\mathbf{U} = \mathbf{U}' - \langle \mathbf{U}' \rangle_W$.

Lo anterior nos permite definir los problemas interdependientes

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{1}(\nabla \mathbf{U}_{1} + \mathbf{I})) = 0, & \text{en } W_{1} \\ [\boldsymbol{\sigma}_{1}(\nabla \mathbf{U}_{1} + \mathbf{I})] \cdot \mathbf{n} - \beta \mathbf{U}_{1} = -\beta \mathbf{U}_{2}, & \text{sobre } \Gamma \\ \mathbf{U}_{1} \quad W - \text{periodica} \\ \end{cases} \\ \begin{cases} \nabla \cdot (\boldsymbol{\sigma}_{2}(\nabla \mathbf{U}_{2} + \mathbf{I})) = 0, & \text{en } W_{2} \\ [\boldsymbol{\sigma}_{2}(\nabla \mathbf{U}_{2} + \mathbf{I})] \cdot \mathbf{n} + \beta \mathbf{U}_{2} = -\beta \mathbf{U}_{1}, & \text{sobre } \Gamma \end{cases}$$
(5-7)

donde, para resolver (5-6) es necesario conocer la solución de (5-7), y viceversa. En lugar de resolver estos problemas de manera simultánea, estableceremos un esquema iterativo de la

forma:

$$\nabla \cdot \left(\boldsymbol{\sigma}_1 (\nabla \mathbf{U}_1^{k+1} + \mathbf{I}) \right) = 0, \quad \text{en } W_1$$
$$\left[\boldsymbol{\sigma}_1 (\nabla \mathbf{U}_1^{k+1} + \mathbf{I}) \right] \cdot \mathbf{n} - \beta \mathbf{U}_1^{k+1} = -\beta \mathbf{U}_2^k, \quad \text{sobre } \Gamma$$
$$\mathbf{U}_1^{k+1} \quad Y - \text{periódica}$$
(5-8)

$$\left(\begin{array}{cc} \nabla \cdot \left(\boldsymbol{\sigma}_2 (\nabla \mathbf{U}_2^{k+1} + \mathbf{I}) \right) = 0, & \text{en } W_2 \\ \left[\boldsymbol{\sigma}_2 (\nabla \mathbf{U}_2^{k+1} + \mathbf{I}) \right] \cdot \mathbf{n} + \beta \mathbf{U}_2^{k+1} = -\beta \mathbf{U}_1^k, & \text{sobre } \Gamma. \end{array} \right)$$
(5-9)

k recorre en conjunto de los números naturales.

Este esquema pertenece a la clase de los algoritmos iterativos de Schwarz y supone que

$$\lim_{k \to \infty} \mathbf{U}_1^k = \mathbf{U}_1 \quad \text{in } W_1$$
$$\lim_{k \to \infty} \mathbf{U}_2^k = \mathbf{U}_2 \quad \text{in } W_2$$

5.3.1. Formulación variacional

Sea $\mathbf{V} \in H^1_{\sharp}$ (véase Sec. 2.3), siguiendo la notación $\mathbf{V}_{\alpha} = \mathbf{1}_{Y_{\alpha}} \mathbf{V}$ con $\alpha = 1, 2$. Las ecuaciones (5-6) y (5-7) pueden escribirse en su formulación variacional:

$$\int_{Y_1} \boldsymbol{\sigma}_1 (\nabla \mathbf{U}_1 + \mathbf{I}) \cdot \nabla \mathbf{V}_1 dV - \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_1 \mathbf{V}_1 dS + \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_2 \mathbf{V}_1 dS = 0,$$
(5-10)

$$\int_{Y_1} \boldsymbol{\sigma}_2 (\nabla \mathbf{U}_2 + \mathbf{I}) \cdot \nabla \mathbf{V}_2 dV + \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_2 \mathbf{V}_2 dS - \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_1 \mathbf{V}_2 dS = 0,$$
(5-11)

y de manera equivalente, para (5-8) y (5-9), se tiene:

$$\int_{Y_1} \boldsymbol{\sigma}_1 (\nabla \mathbf{U}_1^{k+1} + \mathbf{I}) \cdot \nabla \mathbf{V}_1 dV - \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_1^{k+1} \mathbf{V}_1 dS + \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_2^k \mathbf{V}_1 dS = 0,$$
(5-12)

$$\int_{Y_1} \boldsymbol{\sigma}_2 (\nabla \mathbf{U}_2^{k+1} + \mathbf{I}) \cdot \nabla \mathbf{V}_2 dV + \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_2^{k+1} \mathbf{V}_2 dS - \oint_{\Gamma} \beta \mathbf{U}_1^k \mathbf{V}_2 dS = 0.$$
(5-13)

Lo problemas (5-12) y (5-13) se resolverán alternativamente utilizando FEM (como fue descrito en la Sec. 5.2).

Para aplicaciones particulares se suele tener en cuenta propiedades de simetría u otras que permitan simplificar aún más la resolución analítica o numérica de estos problemas. En particular en varios momentos de nuestro trabajo consideraremos que las constituyentes son medios isótropos, lo cual nos permite descomponer el problema local en problemas independientes en las direcciones principales. Esto significa que (5-12) y (5-13) pueden resolverse en cada dirección por separado y la solución general será la suma de ambas.

5.4. Resultados numéricos

Para utilizar FEM con DDM se generan particiones (elementos) en ambas subdominios de forma que sean compatibles en las intersecciones. Para cada elemento se construirán funciones de soporte compacto, y la selección que se hagan de ellas y sus parámetros determinará el espacio de funciones mediante el que será aproximada la solución.

El conjunto de relaciones entre el valor de la variable entre los nodos se puede escribir en forma de sistema de ecuaciones lineales, a la matriz asociada se le conoce como matriz de rigidez [38,124]. El número de ecuaciones de dicho sistema es proporcional al número de nodos, por lo que es común que se trate de sistemas muy grandes que requieren métodos especiales de resolución. Entre los métodos más generales se encuentran los métodos iterativos basados en subespacios de Krylov [155], entre ellos el seleccionado por nosotros fue el Método de Residuo Mínimo Generalizado (GMRES por sus siglas en inglés) [176]. Nuestra elección se basa en que GMRES permite la solución numérica de un sistema no simétrico de ecuaciones lineales, como el que deriva del FEM [155].

Consideraremos primeramente la solución numérica del problema con una única escala microestructural. Las aplicaciones de esta metodología a dos escalas se verá en el capítulo siguiente. A continuación presentaremos la aplicación de esta metodología combinada (M.H.A-FEM-DDM) para diferentes problemas. Aunque se ha avanzado con resultados parciales para algunos compuestos 3D, es necesario desarrollar otras estrategias, ya que requieren un poder de cómputo mucho mayor.

5.4.1. Aplicación a compuestos fibrosos generales

Aplicaremos la metodología descrita a compuestos fibrosos con una amplia variedad de secciones transversales asumiendo que la conductividad tanto de las fibras como de la matriz tiene un comportamiento isótropo. Consideramos un medio conductor formado a partir de una matriz y agrupaciones (racimos) de fibras paralelas, asumiendo una configuración periódica. No existe pérdida de generalidad para este caso si consideramos el problema bidimensional, es decir, considerando solo un plano perpendicular a las fibras. Estas fibras se pueden agrupar formando clústeres que se considerarán como si se trataran de fibras individuales, pero con sección transversal arbitraria. Cada nueva fibra está aislada en una sola celda periódica. Consideraremos que existe un contacto imperfecto entre la matriz y las fibras. Estamos interesados en resolver el problema local y calcular la matriz de propiedades efectivas.

La propiedad de isotropía nos permite descomponer el problema local en dos problemas independientes en las direcciones principales (perpendiculares a las direcciones de las fibras). Esto significa que (5-12) y (5-13) pueden resolverse en cada dirección por separado y la solución general será la suma de ambas. Si bien el uso de software comercial ha sido aplicado para calcular propiedades efectivas de compuestos dieléctricos periódicos con contacto perfecto [112]. Aquí se propone aplicar el FEM haciendo uso del software libre FreeFEM++ [177, 178] (ver Apéndice A).

Para la implementación del método se consideraron dos alternativas diferentes para generar la geometría de las inclusiones.

Se definieron primeramente límites analíticos utilizando la *superfórmula* de Geilis [179] con un ángulo de rotación y se generaron mallas con procedimientos internos de FreeFEM++. Esta es una generalización del concepto de *superelipses* [171] y permite un amplio rango de formas muchas de las cuales son similares a estructuras naturales (figura 5-1). A modo de validación se considera el caso de fibras con sección transversal circular, en el caso de homogeneización simple se lograron reproducir de manera casi exacta los resultados de [171]. En la tabla 6-1 se compararán nuestros resultados considerando dos escalas microestructurales.



Figura 5-1: Ejemplo de la variedad de formas obtenidas por la superformula de Gaelis modificando sus parámetros.

Aunque estos son solo resultados preliminares y requieren más investigación, son alentadores. Se puede observar como hay una cierta relación entre la rugosidad de la forma y el coeficiente efectivo obtenido. Esto se debe a que al aumentar la superficie de contacto la imperfección juega un papel más importante en las interacciones.

Para geometrías secciones transversales más complejas, que no admiten esta representación analítica, procederemos de una manera diferente. Usamos la biblioteca GMSH [180, 181] (ver Apéndice A) para diseñar el contacto y una frontera externa cuadrada. Posteriormente, usando los procedimientos internos del software, generamos dos mallas (una para la matriz y otra para la inclusión) que se cargaron en FreeFEM++ para cálculos posteriores (Sec. 6.1.2). Este método permite el cálculo para geometrías arbitrarias e incorpora capacidades de diseño asistido por ordenador (CAD) a FreeFEM++ que hasta la fecha no estaban disponibles en ninguna otra librería.

En la figura (5-2) muestra los campos locales en diferentes celdas periódicas obtenidos implementando de las alternativas descritas (basado en la superfórmula o en CAD).

Biot	ϕ	ELB [82]	\mathbf{LB} [113]	5-1(a)	5-1(b)	5-1(c)	5-1(d)	UB [113]
1e-05	0.2	1.25e-05		0.667	0.596	0.646	0.638	0.800
0.1		0.114	0.680	0.694	0.652	0.682	0.664	0.820
10		1.131	1.178	1.294	1.411	1.345	1.302	2.467
1e + 06		1.244		1.475	1.680	1.514	1.569	10.800
1e-05	0.3	8.33e-06		0.538	0.446	0.518	0.492	0.700
0.1		0.079	0.556	0.573	0.518	0.562	0.526	0.730
10		1.211	1.279	1.476	1.683	1.558	1.499	3.200
1e + 06		1.416		1.805	2.203	1.863	2.005	15.699
1e-05	0.4	6.25e-06		0.426	0.314	0.411	0.352	0.600
0.1		0.060	0.449	0.466	0.399	0.462	0.393	0.640
10		1.302	1.391	1.690	2.036	1.804	1.750	3.933
1e + 06		1.645		2.239	2.974	2.304	2.660	20.599
1e-05	- 0.5	5.00e-06		0.325	0.190	0.321	0.220*	0.500
0.1		0.049	0.355	0.370	0.286	0.376	0.267*	0.550
10		1.408	1.513	1.946	2.510	2.091	2.020*	4.667
1e + 06		1.961		2.840	4.336	2.877	3.626*	25.499
1e-05	- 0.6	4.17e-06		0.231	n/a	0.242	n/a	0.400
0.1		0.041	0.272	0.280		0.300		0.460
10		1.534	1.648	2.260		2.429		5.400
1e+06		2.427		3.766		3.670		30.399

Tabla 5-1: Resultados para diferentes secciones transversales de fibra de acuerdo las formas presentadas en la figura 5-1 ($\rho = 50$).

* para el rombo, evitando el punto de percolación, se reemplazó $\phi=0.5$ por 0.48



Figura 5-2: Primera componente de la solución para un problema local en medios fibrosos.

5.4.2. Aplicación a inclusiones esféricas

Consideraremos un medio bifásico formado por partículas, las cuales se agrupan formando conglomerados. Pudiera pensarse, por ejemplo en un coloide donde comienza a ocurrir la floculación [26]. Por simplicidad asumiremos que los conglomerados tienen forma esférica. Consideraremos que existe contacto imperfecto en la interfaz. Nos interesa resolver los problemas locales (en las tres direcciones) y calcular la matriz de propiedades efectivas final.

La figura 5-3 muestra las soluciones del problema local para una partícula esférica mediante FEM-DDM (debido a problemas de representación gráfica solo se pudo mostrar el efecto en la matriz de la inclusión esférica). Para esta aplicación solo se obtuvieron resultados preliminares, debido a la implementación realizada no se contaba con recursos de computo suficientes. Se esperan mayores avances aprovechando las propiedades de simetría (Apéndice B).



Figura 5-3: Solución para el problema local en la matriz, considerando inclusiones esféricas.

Capítulo 6

Aplicaciones de la Homogeneización Reiterada

6.1. Microfibras difusas y nanoreforzadas

En la presente sección investigamos las propiedades efectivas de un tipo de compuestos de fibras recubiertas conocidas como *fibras difusas*. Este tipo de compuestos poseen una geometría donde las fibras principales se encuentran recubiertas con nanofibras alineadas normal o tangencialmente, las cuales están incrustadas en una matriz generalmente polimérica [20,182]. Estas fibras mejoradas tienen el potencial de alterar las propiedades de la interfaz, pero proporcionan funcionalidad adicional como sensores al aprovechar las propiedades multifuncionales de las nanofibras. En particular, para compuestos basados en carbono estas forman parte de una categoría mayor conocida como fibras de carbono avanzadas.

En la literatura existen pocos modelos que intenten identificar el comportamiento general de tales compuestos. En [183] se calcula la respuesta mecánica de las fibras difusas utilizando métodos micromecánicos, mientras que en [184] se obtienen numéricamente las propiedades mecánicas efectivas a partir del M.H.A. En [185] se introduce un modelo con retardo, y en [182] se utiliza un método autoconsistente modificado, para tener en cuenta la capa de interfaz adicional entre la fibra y la matriz.

Compararemos la aplicación del esquema MHA-FEM-DDM con una escala para una geometría compleja bidimensional con la aplicación de la H.R. en un caso unidimensional (descrito en la Sección 6.1.1). Se han considerado solo fibras cuadradas puesto que simplifican la obtención y representación de las soluciones en ambos casos (fig. 6-1).

En principio el número de nanofibras pudiera variar, siendo siempre muy superior al de microfibras y cubriendo su superficie. Otra consideración a tener en cuenta es la longitud relativa de las nanofibras con respecto a el espacio entre microfibras. Ambas consideraciones son importantes a la hora de elegir modelos para su estudio, nosotros propondremos solo dos de ellos. Un primer modelo, multilaminado, considera fibras largas y desde el punto de vista formal se reduce a un medio laminado multiescala. Se trata de modelos que representan un mismo medio fibroso donde cada una de sus fibras presenta refuerzos en su superficie. Para el segundo modelo, dada su complejidad, fue necesario considerar técnicas especiales tanto del tipo analítico como numéricas para su solución. De este último solo se presentará un breve esbozo metodológico pues



Figura 6-1: Esquema de un medio formado por fibras rectangulares reforzadas (en color azul se encuentra representada la fibra y en blanco la matriz).

aún continúa en investigación, aunque los aspectos teóricos involucrados ya han sido abordados en esta tesis.

Observación: Si bien estos modelos son mucho más simples que los propuestos por [182, 185], reflejan las potencialidades de la H.R. en comparación con la homogeneización simple.

6.1.1. Modelo multi-laminado

Consideraremos a un medio fibroso con fibras rectangulares reforzadas mediante fibras más pequeñas incrustadas en sus caras. Suponiendo que las componentes son isotrópicas y denotando por

$$A^{\varepsilon}(x) = A^{\varepsilon}\left(\frac{x}{\varepsilon}, \frac{x}{\varepsilon^2}\right) = A(y, z) = a(y, z)I$$

Definiremos dicha conductividad de la manera siguiente

$$a(y_1, y_2, z_1, z_2) = \begin{cases} a_c, & y_1 < \bar{y}_1, y_2 < \bar{y}_2, \\ a_0, & y_1 > \bar{y}_1, y_2 > \bar{y}_2, \\ \sigma_1(y_1, y_2), & y_1 < \bar{y}_1, y_2 > \bar{y}_2, \\ \sigma_2(y_1, y_2), & y_1 > \bar{y}_1, y_2 < \bar{y}_2., \end{cases}$$
(6-1)

donde

$$\sigma_1(z_1, z_2) = \sigma_1(z_1) = \begin{cases} a_c, & z_1 < \bar{z}_1, \\ a_0, & z_1 > \bar{z}_1, \end{cases}$$
$$\sigma_2(z_1, z_2) = \sigma_2(z_2) = \begin{cases} a_c, & z_2 < \bar{z}_2, \\ a_0, & z_2 > \bar{z}_2. \end{cases}$$

Con esta configuración se obtiene un medio bifásico formado por microfibras ortoédricas conectadas mediante nanofibras también ortoédricas, como se muestra en la figura 6-2.



Figura 6-2: Medio fibroso multiescala (multilaminado).

Por simplicidad consideraremos $\bar{y}_1 = \bar{y}_2 = \sqrt{\Phi_c} = \sqrt{\alpha \Phi}; \bar{z}_1 = \bar{z}_2 = \tau$ donde α es un parámetro de agregación, Φ_c es la concentración de las fibras mayores, Φ es la concentración total de las fibras, y el parámetro τ determinará la forma de las fibras menores (su grosor). Nótese que de la construcción utilizada:

$$\Phi = \Phi_c + \Phi_0 = \Phi_c + 2\gamma (1 - \sqrt{\Phi_c})\sqrt{\Phi_c},$$

donde Φ_0 es la concentración de las fibras menores. Es decir, conociendo ambas concentraciones es posible determinar el grosor de las nanofibras

$$\tau = \frac{1}{2} \frac{\Phi/\Phi_c - \sqrt{\Phi_c}}{1 - \sqrt{\Phi_c}},\tag{6-2}$$

y, en particular, para $\alpha = 1$ (medio totalmente agregado) se tiene $\tau = 0, \Phi = \Phi_c$. Así el modelo se reduce a un medio fibroso con una única escala microestructural. Desafortunadamente, para

 $\alpha = 0$ (medio totalmente disperso) el modelo no está bien definido pues no puede existir conexión entre las fibras.

El medio anterior es posible interpretarlo como un medio multilaminado formado por láminas heterogéneas cuyas fases son, a su vez láminas en diferentes direcciones (fig. 6-3). Un medio así también puede ser visto como un caso límite del presentado en la sección anterior para fibras de refuerzo largas, y físicamente puede ocurrir cuando existe entrelazamiento entre las nanofibras que se encuentran adheridas a microfibras adyacentes. Visto desde el punto de vista del estudio de nanofluidos pudiera interpretarse como un coloide que ha entrado en un proceso de gelificación, donde comienzan a formarse grupos de agregados (que serían las microfibras) conectados por cadenas estructuradas (representados mediante las nanofibras).

Un medio de este tipo, con contacto imperfecto entre las faces, es posible estudiarlo con la metodología desarrollada en la Sección 4.2. Para ello se propondrá un esquema con tres escalas microestructurales (fig. 6-3), donde las dos meso-escalas estarán formadas por medios laminados en diferentes direcciones de acuerdo a la región del plano que representan. En este



Figura 6-3: Otra interpretación del medio descrito.

sentido podemos descomponer el coeficiente (6-1) en dos regiones con valores efectivos parciales, y a su vez en dichas regiones se subdividen de acuerdo a los valores de los coeficientes efectivos de la escala anterior. Esto es, reemplazar a en (6-1), por

$$\tilde{a}(y,z,t) = \begin{cases} L_1(z,t), & y_1 < \sqrt{\Phi_c}, \\ L_2(z,t), & y_1 > \sqrt{\Phi_c}, \end{cases}$$
(6-3)

$$L_1(z,t) = \begin{cases} a^{(2)}, & z_2 < \sqrt{\Phi_c}, \\ L'_1(t), & z_2 > \sqrt{\Phi_c}, \end{cases}$$
(6-4)

$$L_2(z,t) = \begin{cases} L'_2(t), & z_2 < \sqrt{\Phi_c}, \\ a^{(1)}, & z_2 > \sqrt{\Phi_c}, \end{cases}$$
(6-5)

$$L_1'(t) = \begin{cases} a^{(2)}, & t_1 < \tau, \\ a^{(1)}, & t_1 > \tau, \end{cases}$$
(6-6)

$$L_2'(t) = \begin{cases} a^{(2)}, & t_2 < \tau, \\ a^{(1)}, & t_2 > \tau, \end{cases}$$
(6-7)

donde τ está dado por la ecuación (6-2).

Dada la simetría del medio (Apéndice B) no pierde generalidad considerar los laminados en las direcciones propuestas, siendo equivalente el análisis si se intercambian $y_1 \ge y_2$. La premisa para este tratamiento es que los coeficientes efectivos derivados de ambos medios (representados por $a \neq \tilde{a}$) serán próximos entre sí.

Aplicaremos la metodología desarrollada para compuestos laminados, generalizándola a 3 escalas microestructurales. De esta forma se obtienen dos coeficientes efectivos intermedios que serán utilizados en el cálculo del coeficiente de la escala anterior. En particular:

$$(L_{1})_{ll}^{1}(z) = \begin{cases} a^{(2)}, & z_{2} < \sqrt{\Phi_{c}}, \\ \widehat{(L_{1}')}_{ll}, & z_{2} > \sqrt{\Phi_{c}}, \end{cases} \qquad (L_{2})_{ll}^{1}(z) = \begin{cases} \widehat{(L_{2}')}_{ll}, & z_{2} < \sqrt{\Phi_{c}}, \\ a^{(1)}, & z_{2} > \sqrt{\Phi_{c}}, \end{cases} \qquad (6-8)$$
$$\widehat{(L_{1}')}_{ll} = \begin{cases} P(\tau, \beta), & l = 1, \\ Q(\tau), & l = 2, \end{cases} \qquad \widehat{(L_{2}')}_{ll} = \begin{cases} Q(\tau), & l = 1, \\ P(\tau, \beta), & l = 2, \end{cases} \qquad (6-9)$$

$$(L_1)_{ll} = \begin{cases} Q(\tau), & l = 2, \end{cases}$$

siendo

$$P(\tau,\beta) \equiv \left(\frac{\tau}{a^{(2)}} + \frac{1-\tau}{a^{(1)}} + \frac{1}{\beta}\right)^{-1}, \qquad Q(\tau) \equiv \tau a^{(2)} + (1-\tau)a^{(1)}.$$

Para la siguiente escala, y escalas superiores no se considerará imperfección en los contactos. De esta manera se obtienen

$$(\widehat{L_{1}})_{ll} = \begin{cases} \sqrt{\Phi_{c}} a^{(2)} + (1 - \sqrt{\Phi_{c}}) (\widehat{L'_{1}})_{ll}, & l = 1, \\ \left(\frac{\sqrt{\Phi_{c}}}{a^{(2)}} + \frac{1 - \sqrt{\Phi_{c}}}{(\widehat{L'_{1}})_{ll}} \right)^{-1}, & l = 2, \end{cases}$$
(6-10)

$$(\widehat{L}_{2})_{ll} = \begin{cases} \sqrt{\Phi_{c}}(\widehat{L}_{2}')_{ll} + (1 - \sqrt{\Phi_{c}})a^{(1)}, & l = 1, \\ \left(\frac{\sqrt{\Phi_{c}}}{(\widehat{L}_{2}')_{ll}} + \frac{1 - \sqrt{\Phi_{c}}}{a^{(1)}}\right)^{-1}, & l = 2. \end{cases}$$
(6-11)

Denotando por

$$r_c = \frac{\sqrt{\Phi_c}}{1 - \sqrt{\Phi_c}}$$

y sustituyendo (6-8)-(6-11) en (4-59), se obtiene finalmente

$$\widehat{a}_{11} = \left(\left(r_c a^{(2)} + P(\tau, \beta) \right)^{-1} + \left(r_c^{-1} a^{(1)} + Q(\tau) \right)^{-1} \right)^{-1}, \tag{6-12}$$

$$\widehat{a}_{22} = \left(\frac{1}{a^{(1)}} + \frac{r_c}{P(\tau,\beta)}\right)^{-1} + \left(\frac{1}{a^{(2)}} + \frac{r_c^{-1}}{Q(\tau)}\right)^{-1}.$$
(6-13)

6.1.2. Medio fibroso multi-escala

Consideraremos una fibra reforzada con nanofibras (pinchos) donde la matriz se recalcula teniendo en cuenta que pueden quedar flotando nanofibras no agregadas (death-ends). Consideraremos solo fibras rectangulares, aunque el análisis que presentaremos a continuación puede extenderse de forma directa a geometrías más complejas utilizando el concepto de Estructura Regular [186] y los métodos de homogeneización asociados [187, 188].

Este modelo es susceptible a ser resuelto por la vía analítica. En la Sección 4.3 se presentó una extensión de la metodología utilizando el Análisis de Variables Complejas con fibras cilíndricas. Este tipo de representación puede ser muy útil para el caso donde las nanofibras no se encuentran incrustadas sino flotando en la matriz. La variante de solución propuesta a continuación se basa en los métodos numéricos presentados en el Capítulo 5.

(Figura 6-4) [189]



Figura 6-4: Mallas generadas con GMSH para los cálculos.

6.2. Ganancia

Ya hemos visto la ganancia de propiedades añadiendo las inclusiones en una cierta matriz y comparando la nueva propiedad con la de dicha matriz. En este apartado nos interesará otro tipo de ganancia: nos interesa analizar cómo la geometría y distribución de las inclusiones influyen en el coeficiente efectivo. En particular, analizaremos la ganancia comparando el problema de dos microescalas en el medio con respecto al caso en el que solo se considera una escala.

En [26] se desarrolló un modelo de homogeneización *ad hoc* para analizar el papel de los procesos de agregación y la resistencia térmica interfacial en la conductividad térmica efectiva de nanofluidos y nanocompuestos. También se han reportado ganancias para compuestos multiescala reforzados con fibras y partículas [49–51] considerando un contacto perfecto. Esta también ha sido en el caso de laminados [53, 135] teniendo en cuenta el contacto imperfecto.

Dadas las conductividades térmicas de la matriz $(A^{(1)})$ y de las inclusiones $(A^{(2)})$. Denotaremos por \hat{A}_{CH} y \hat{A}_{RH} , el coeficiente efectivo del medio obtenido mediante homogeneización convencional y reiterada, respectivamente. Para nuestro caso, al tratarse de componentes isotrópicas, podemos escribirlos en términos de sus equivalentes escalares:

$$A^{(1)} = a^{(1)}I, A^{(2)} = a^{(2)}I,$$

 $\hat{A}_{CH} = \hat{a}_{CH}I, \hat{A}_{RH} = \hat{a}_{RH}I,$

donde I es la matriz identidad.

Estas cantidades dependerán de la fracción de volumen de inclusiones (ϕ) , la relación de conductividad de fase $(\rho = a^{(2)}/a^{(1)})$, la geometría y la barrera térmica (caracterizada por β). La geometría se caracteriza por la forma de las inclusiones, por lo tanto \hat{a}_{RH} también dependerá de la forma de los conglomerados y del parámetro de agregación (α) .

Estamos particularmente interesados en los beneficios o inconvenientes de considerar dos escalas (homogeneización reiterada) frente a una sola escala (homogeneización convencional). Para este propósito definimos una *función de ganancia* siguiendo la propuesta de [49], en la forma:

$$a_{gain}(\alpha, \phi, \rho, \beta) \equiv \frac{\hat{a}_{RH}(\alpha, \phi, \rho, \beta)}{\hat{a}_{CH}(\phi, \rho, \beta)}.$$
(6-14)

Consideraremos ahora una ganancia en la forma:

$$a_{gain}^J = \frac{\hat{a}_{RH}^J}{\hat{a}_{CH}}$$

donde \hat{a}_{CH} es el coeficiente efectivo del caso de una sola escala microestructural, es decir, para $\phi_p = \phi, \phi_a = 1, \text{ y } \hat{a}_{RH}$ es el coeficiente efectivo del modelo J, ya sea un modelo unidimensional como los propuestos en la Sección 4.4, algún modelo bidimensional (secciones 4.3 o 4.4.3) u otros.

6.2.1. Ganancia 1D

Aunque para la homogeneización clásica (4-126) y (4-130) son equivalentes, (4-127) y (4-131) difieren en el coeficiente que acompaña a B^{-1} . De (4-126) y (4-127) se obtiene

$$a_{gain(11)}^{I} = a_{gain(33)}^{I} = 1, (6-15)$$

$$a_{gain(22)}^{I} = \left(1 - \frac{\frac{\Phi - 1}{B}}{\frac{1 - \Phi}{a^{(1)}} + \frac{\Phi}{a^{(c)}} + \frac{1}{B}}\right)^{-1},$$
(6-16)

y de (4-130) y (4-131):

$$a_{gain(11)}^{II} = a_{gain(33)}^{II} = 1 - \frac{\Phi(1 - \Phi_a)(a^{(c)} - a^{(nc)})}{(1 - \Phi)a^{(1)} + \Phi a^{(c)}},$$
(6-17)

$$a_{gain(22)}^{II} = \left(1 - \frac{\Phi(1 - \Phi_a)(\frac{1}{a^{(c)}} - \frac{1}{a^{(nc)}})}{\frac{1 - \Phi}{a^{(1)}} + \frac{\Phi}{a^{(c)}} + \frac{1 + \Phi}{B}}\right)^{-1}.$$
 (6-18)

La figura 6-5 muestra el impacto de la agregación y de la elección de $a^{(nc)}$ en la ganancia



Figura 6-5: Ganancia de los modelos considerando dos niveles miscrostructurales contra uno: El gráfico (a) representa el modelo I para diferentes valores del número de Biot (ecuación (6-16)). Los gráficos (b), (c) y (d) representan el modelo II para diferentes formulaciones de $a^{(nc)}$ (ecuación (6-18)) y contacto perfecto: (b) representa un caso estático, (c) el modelo de Bruggeman y (d) la media armónica. En todos los casos se tomó $\Phi_a = 0.35$.

6.2.2. Ganancia 2D

Analizaremos el efecto de la barrera térmica en la interfaz para medios bifásicos cuyas inclusiones tienen una conductividad más alta que la matriz ($\rho = 500$).

La figura 6-6 muestra la influencia de la agregación en la ganancia de propiedad incluso en el caso de contacto perfecto. La ganancia tiende a crecer con la concentración y para las concentraciones más altas, la ganancia oscila alrededor de la obtenida para $\phi = 0.6$ y comienza a disminuir reportando pérdidas cerca del máximo $\phi = \pi/4 \approx 0.785$ (percolación).



Figura 6-6: Ganancia para $\rho = 500$ como función de la agregación, para diferentes concentraciones y contacto perfecto.

Para un mayor número de Biot (mejor contacto), la ganancia continúa su tendencia a crecer para concentraciones bajas y disminuir con concentraciones altas (figura 6-7). Estas ganancias, como en el contacto perfecto, tienen un máximo de hasta 9% para $\phi \in (0.5, 0.6)$ y $\alpha \approx 0.6$. Vale la pena notar el caso Bi = 2 donde no hay ganancia/pérdida independientemente de ρ .

Para números de Biot más pequeños (peor contacto) el comportamiento es opuesto: disminuye para concentraciones pequeñas con cierta pérdida y comienza a crecer para concentraciones más altas (figura 6-8). El valor de concentración donde ocurre este cambio de comportamiento disminuye cuando el número de Biot disminuye, reportando ganancias para valores más pequeños del número de Biot y concentraciones más altas. Por otra parte, la ganancia máxima aumenta cuando el número de Biot disminuye, siendo superior a 25 % en el caso de $Bi \rightarrow 0$, que representa el desacoplamiento de las fases. La independencia de ρ en los valores donde no hay ganancia/pérdida también se pone de manifiesto en este caso.



Figura 6-7: Ganancia para $\rho = 500$ como función de la agregación, para diferentes concentraciones y valores altos del número de Biot ($Bi \in \{10^3; 10^2\}$).



Figura 6-8: Ganancia para $\rho = 500$ como función de la agregación, para diferentes concentraciones y valores bajos del número de Biot ($Bi \in \{10^{-1}; 10^{-2}; 10^{-5}\}$).
6.2.3. Soluciones numéricas

En la Tabla 6-1 comparamos nuestro enfoque DDM dos escalas con DDM para homogeneización simple [171], aproximaciones analíticas [156] y cotas variacionales [113]; para diferentes números de Biot ($Bi = 10^k$) y concentraciones (ϕ). Sólo se considera el caso de fibras con sección transversal circular. Para los cálculos suponemos una relación de agregación de 0.25. Se observa, además, como nuestros resultados se encuentran entre las cotas mejoradas superiores e inferiores [113].

Biot	ϕ	LB [113]	Classic FEM [78]	DDM [171]	*Mio*	Analytical [190]	UB [113]
1e-07	0.3	0,5376	0,5376		0.537873	0.538462	0,7000
1e-05	0.3	0,5376	0,5376		0.537876	0.538473	0,7000
0.001	0.3	0,5378	0,5380	0,5381	0.538229	0.539608	0,7003
0.01	0.3	0,5394	0,5412	0,5413	0.541419	0.54976	0,7030
0.1	0.3	0,5549	0,5715	0,5716	0.571727	0.636821	0,7286
1	0.3	0,6790	0,7720	0,7721	0.77203	0.967106	0,9000
10	0.3	1,0321	1,1118	1,1118	1.11203	1.18381	1,2000
100	0.3	1,1967	1,2093	1,2093	1.2124	1.21818	1,2882
1000	0.3	1,2194	1,2209	1,2209	1.22087	1.22182	1,2988
1e+05	0.3	1,2220	1,2222		1.22175	1.22222	1,3000
1e+07	0.3	1,2220	1,2223		1.22176	1.22222	1,3000
1e-07	0.75	0,0696	0,0784		0.078890	0.142857	0,2500
1e-05	0.75	0,0696	0,0784		0.078896	0.142867	0,2500
0.001	0.75	0,0702	0,0790	0,0793	0.079484	0.143859	0,2507
0.01	0.75	0,0753	0,0844	0,0847	0.084804	0.152816	0,2575
0.1	0.75	$0,\!1252$	$0,\!1358$	0,1360	0.136148	0.236911	0,3214
1	0.75	0,4908	0,5002	0,5003	0.500276	0.747508	0,7500
10	0.75	1,2968	1,3048	1,3047	1.3049 5	1.46559	1,5000
100	0.75	1,5872	1,6279	1,6278	1.62761	1.64385	1,7206
1000	0.75	1,6240	$1,\!6716$	1,6715	1.65818	1.66435	1,7470
1e+05	0.75	1,6282	$1,\!6766$		1.65104	1.66664	1,7500
1e+07	0.75	1,6282	1,6767		1.65106	1.66667	1,7500

Tabla 6-1: Comparación con resultados conocidos en el caso de fibras circulares $(K_i/K_m = 2)$.

Capítulo 7

Conclusiones y recomendaciones

El estudio de las propiedades macroscópicas de medios conductivos heterogéneos es un tema de interés debido a su importancia clave en las aplicaciones, en especial en problemas de transferencia de calor. La utilización de nanofluidos, por ejemplo, ha supuesto un reto en la obtención de modelos que permitan predecir sus propiedades. Fenómenos como la agregación y la resistencia térmica interfacial juegan un papel relevante en dicho problema [26,27,29].

En el presente trabajo se abordó la modelación y obtención de la conductividad efectiva de materiales periódicos dependientes de varias escalas microestructurales con condiciones de contacto imperfecto en las interfaces. La metodología desarrollada permitió derivar el problema homogeneizado, los problemas locales, y los coeficientes efectivos para un problema tridimensional general. Siendo posible obtener fórmulas analíticas en algunos casos y el desarrollo de nuevas técnicas numéricas para geometrías más complejas.

Fue posible analizar la influencia en el comportamiento efectivo de la concentración, conductividades de las fases y contacto imperfecto. Se pudieron observar ganancias de la conductividad efectiva al considerar dos escalas con respecto al modelo de homogeneización simple o convencional.

7.1. Logros

En el Capítulo 2 se introdujo un modelo matemático por medio de las leyes fundamentales de la conducción de calor para un medio periódico rápidamente oscilante. Una característica fundamental fue considerar dos escalas geométricas y una condición de contacto imperfecto entre las constituyentes. Teniendo todo esto en cuenta, se obtuvieron las formulaciones fuertes y débiles del problema que permiten abordar el estudio de dicho modelo por diferentes métodos, analíticos y numéricos. Los fundamentos matemáticos de las diferentes teorías involucradas en este estudio que se consideraron relevantes fueron abordados de manera resumida en el Capítulo 3.

Para el análisis de las propiedades macroscópica se logró desarrollar la metodología de *homogeneización reiterada* en el Capítulo 4. Este método permite hallar las propiedades efectivas del medio homogeneizado a partir de una serie de problemas recurrentes definidos en una celda periódica. En este sentido los Problamas Locales (4-15)-(4-18) y (4-28)-(4-31); el Problema Homogeneizado (4-37)-(4-38) y los coeficientes efectivos (4-21) y (4-36) son la base de todo nuestro estudio. De esta forma también se construyó una solución asintótica formal del problema original (ecuaciones (4-1),(4-23),(4-27),(4-32)).

Dichos problemas se pueden resolver analíticamente para muy pocas geometrías. En particular se obtuvieron fórmulas analíticas exactas para los coeficientes efectivos en el caso unidimensional general (laminados) [52, 53] considerando un medio trifásico (4-74). Para el caso bidimensional se obtivieron formulas analíticas aproximadas considerando secciones transversales circulares, y constituyentes isótropas a partir de diferentes truncamientos de un sistema de infinitas ecuaciones lineales (tabla 4-2), y como serie de potencias para concentraciones bajas (4-135). En ambos casos se recuperan los casos límite de contacto perfecto [2, 143, 144], y se validaron los resultados comparándolos con otros propuestos en la literatura [78, 142, 153].

Desde el punto de vista numérico, en el Capítulo 5, se obtuvieron algoritmos que permiten solucionar los problemas locales mediante FEM y calcular los coeficientes efectivos para casos específicos en dos y tres dimensiones [189,191]. Específicamente se utilizó DDM para incorporar la información del contacto imperfecto en los esquemas de solución tradicionales. Los algoritmos combinados M.H.A.-FEM-DDM desarrollados permitieron resolver problemas locales 2D y obtener coeficientes efectivos considerando fibras de sección transversal arbitraria. También se obtuvieron algunos avances en el caso 3D para inclusiones esféricas.

En el Capítulo 6 se analizó la influencia de la geometría y distribución de las inclusiones en el coeficiente efectivo en casos específicos. En particular, fue de mayor interés el estudio de la ganancia, entendida como el cociente de los coeficientes considerando dos microescalas (3 escalas en total) con respecto al caso en el que solo se considera una microescala (2 escalas en total). Se encontró, además, una dependencia de dicha ganancia respecto al parámetros que modela la resistencia interfacial.

7.2. Publicaciones

Durante el desarrollo de este proyecto fueron publicados los siguientes trabajos en diferentes revistas y eventos científicos.

- Abordando la perspectiva analítica en la Homogeneización Reiterada con contacto térmico perfecto e imperfecto, con aplicaciones a nanofluidos:
- [52] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, L. D. Pérez-Fernández, and F. J. Sabina, "Reiterated homogenization of a heat conduction problem with interfacial thermal barrier," en *Exposición Internacional de Materiales Compuestos 2018*, EXPO MATCO 2018, (CDMX, México), MATCO Red, Sep. 20–21 2018.
- [53] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, L. D. Pérez-Fernández, and F. J. Sabina, "Reiterated homogenization applied to nanofluids with an interfacial thermal resistance," *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, vol. 18, no. 3, pp. 361–384, 2020.
 - Abordando la solución numérica de problemas locales mediante el Método de los Elementos Finitos:

- [189] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, J. Mesejo-Chiong, and L. D. PérezFernández, "Finite element and domain decomposition methods in fibrous composites via asymptotic homogenization," en 5th Brazilian Conference on Composite Materials, BCCM 5, (São Carlos, SP, Brazil), CNPq, Jul. 21–24 2021.
- [191] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, J. Mesejo-Chiong, and L. D. Pérez-Fernández, "The interfacial thermal resistance in composites accounted by the reiterated homogenization and finite element methods," en 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, ICTAM 2021, (Milan, Italy), International Union of Theoretical and Applied Mechanics, Aug. 22–27 2021.
- [192] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, J. Mesejo-Chiong, "Reiterated homogenization for conductive media with interfacial resistance: a FEM+DDM based approach," en 1ra Conferência Ibero-Americana de Materiais Compósitos 2021, IAMaC 2021, (Porto, Portugal), Faculdade de Engenharia da Universidade do Porto, Jul. 29–30 2021.

7.3. Recomendaciones para trabajos futuros

Una extensión directa de los resultados presentados es las soluciones del problema local para casos tridimensionales, aprovechando inicialmente propiedades de simetría (Apéndice B) y extendiendo dichos resultados a casos más generales [193]. Particular interés tienen las investigaciones relacionadas con el desarrollo y estudio de nanofluidos, por ejemplo, para su utilización como refrigerantes.

Una línea de trabajo futura es ahondar en el estudio barreras térmicas no uniformes, de manera similar a los trabajos de [72, 113, 114]. También resulta de interés explorar otros tipos de contacto imperfecto que aparecen en diferentes aplicaciones [65, 71, 73, 194] y los casos límites correspondientes a inclusiones vacías (material perforado) o superconductoras [139–141].

Otras posibles extensiones relacionadas entran en el caso no estacionario de la ecuación del calor, el electromagnetismo [195, 196], la termoelasticidad [197], y la propagación de ondas elásticas [198–200]. También es posible utilizar esta metodología en medios más generales (termo-magneto-electroelásticos) [37, 119, 201] y en dinámica de fluidos [66].

Apéndices

Apéndice A

Software empleado

A.1. FreeFEM++ (resolución de formulación variacional)

FreeFEM++ es un lenguaje de programación escrito en C++. Es desarrollado y mantenido por la Universidad Pierre y Marie Curie y el Laboratorio Jacques-Louis Lions, y se distribuye bajo licencia GPL. La parte más específica de este software y que lo diferencia de los existentes es que la solución se realiza de forma automática a partir de su formulación variacional, es decir es muy cercano a la formulación matemática estándar. Al ser un lenguaje de programación basado en C++ es extensible y permite la interacción con otros programas y librerías desarrollados en este lenguaje, o vincularse con otros lenguajes mediante las capas de abstracción compatibles con C++ [177, 178]. Otras características de FreeFEM++:

- Puede automatizar la discretización del espacio (incluye métodos adaptativos).
- Permite escoger y modificar el método de solución del sistema lineal derivado del FEM.
- Es compatible de forma nativa con múltiples formatos y software especializados.

A.2. GMSH (generación de mallas)

GMSH es una biblioteca generadora de mallas diseñada para elementos finitos 2D y 3D. Está formado por un motor de diseño asistido por ordenador (CAD) y un postprocesador integrados. Creado por C. Geuzaine and J.-F. Remacle [180, 181], es desarrollado y mantenido de manera comunitaria y se distribuye bajo licencia GPL. Proporciona una herramienta de mallado rápida, liviana y fácil de usar con entrada paramétrica y capacidades de visualización avanzadas. La entrada de datos se realiza de forma interactiva ya sea utilizando una interfaz gráfica (GUI), archivos de texto ascii o utilizando la interfaz de programación de aplicaciones (API) en lenguajes como C++, C, Python o Julia.

En la figura A-1 se pueden distinguir algunas de las ventajas de la biblioteca, en termino de creación de mallas tales como:

- Definición individual del tamaño de la malla alrededor de un punto.
- Creación de nodos transfinitos (en el sentido de que las distancias varían de acuerdo a una serie geométrica) en líneas y planos.

• Forzar periodicidad durante la creación de nodos y elementos en fronteras *opuestas* (las fronteras y el sentido en que se conectan es elegible).



Figura A-1: Ejemplo de mallas generadas con GMSH. En rojo se señalan algunas de las características de mallado avanzadas distinguibles (Figura tomada de [189]).

A.3. Repositorio digital de software

El software AHM-FEM-DDM desarrollado para la presente investigación se encuentra disponible de forma libre (bajo Licencia BSD-3-Clause) en el repositorio digital

https://github.com/Rpyo/FEM-Homogenization

de la plataforma de desarrollo colaborativo GitHub.

Apéndice B

Simplificación de los problemas locales ante simetrías

La intención de este apéndice es, dadas ciertas invarianzas por simetrías espaciales del medio (específicamente del tensor de coeficientes que determinan la propiedad de interés), encontrar problemas más simples que permitan resolver de manera equivalente los problemas locales y el cálculo de los coeficientes efectivos (B-4). Nos interesa mostrar la influencia de propiedades de simetría (fig. B-1) para facilitar la búsqueda de coeficientes efectivos, ya sea realizando cálculos en un dominio más pequeño o porque se puedan calcular con facilidad a partir de otros. Nos centraremos en particular en las simetrías reflexivas, ya que en parte de la tesis se aplican estas propiedades. Nos basaremos en el trabajo de [3].

Por conveniencia, consideraremos como dominio el *n*-cubo $W = \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]^n$. Consideraremos un medio con dicho dominio de periodicidad, y consideraremos que tiene una cierta simetría en el mismo.



Figura B-1: Ejemplo de formas con simetrías reconocibles.



Figura B-2: Ejemplo de medios bifásicos simétricos.

Llamaremos Problema Local a un problema definido en el n-cubo W de la forma

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ik} + a_{ij} \frac{\partial N^{(k)}}{\partial y_j} \right) = 0, \quad \text{en } W, \tag{B-1}$$

$$N^{(k)} \in W$$
 – periódica, (B-2)

$$\left\langle N^{(k)} \right\rangle_W = 0.$$
 (B-3)

Donde $A(y) = (a_{ij}(y))$ es un tensor simétrico, W-periódico y definido positivo. Aquí la condición (B-3) se añadió a esta definición solo por unicidad, pudiera ser omitida y la solución sería única salvo una constante aditiva.

Estos problemas están estrechamente relacionados con la teoría de la Homogeneización Matemática, la cual tiene una amplia aplicación para el estudio de los materiales compuestos. En particular mediante el Método de Homogeneización Asintótica se puede probar que si $A(x/\varepsilon)$ es el tensor de propiedades de un material compuesto periódico con período ε , entonces, para $\varepsilon << 1$, la **Propiedad Efectiva** del medio estará dada por

$$\hat{a}_{ij} = \left\langle a_{ij} + a_{ik} \frac{\partial N^{(j)}}{\partial y_k} \right\rangle_W.$$
(B-4)

B.1. Ejemplo

Sea un medio bidimensional formado por una matriz e inclusiones en forma de círculos de radio r < 1 (fig. B-2 a). Sea

$$A(y) = \begin{pmatrix} a_{11}(y) & 0\\ 0 & a_{22}(y) \end{pmatrix}, \qquad a(y) = \begin{cases} a^{(1)}, & |y| > r,\\ a^{(2)}, & |y| < r. \end{cases}$$

Para $N = N^{(1)}$, la ecuación (B-1) se puede escribir, entonces, como

$$\frac{\partial}{\partial y_1} \left(a_{11} \frac{\partial N}{\partial y_1} \right) + \frac{\partial}{\partial y_2} \left(a_{22} \frac{\partial N}{\partial y_2} \right) = -\frac{\partial a_{11}}{\partial y_1}.$$
 (B-5)

Observación: Esta ecuación es válida para cada uno de los subdominios disjuntos |y| > re |y| < r. Para que el problema local tenga sentido sería necesario considerar condiciones en |y| = r, las cuales se abordarán más adelante, pero serán obviadas por el momento.

Denotaremos por $\sigma_1 = a_{11} \frac{\partial N}{\partial y_1}$ y $\sigma_2 = a_{22} \frac{\partial N}{\partial y_2}$ a los flujos en las direcciones y_1 y y_2 , respectivamente. Se cumple entonces lo siguiente:

- (a) Debido a las simetrías de reflexión de la celda, los coeficientes a_{11} y a_{22} son pares respecto a ambas variables y_1, y_2 .
- (b) De aquí que el miembro derecho de la ecuación continúa siendo par (P) respecto a y_2 pero es impar (I) respecto a la variable y_1 .
- (c) De lo anterior se tiene que el miembro derecho es la suma de dos funciones pares respecto a y_2 e impares respecto a la variable y_1 .
- (d) Para que esto sea posible el flujo σ_1 tiene que ser par respecto a ambas variables y σ_2 impar respecto a ambas variables.

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial y_1} \underbrace{\left(a_{11} \frac{\partial N}{\partial y_1}\right)}_{(c)I,P} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial y_2} \underbrace{\left(a_{22} \frac{\partial N}{\partial y_2}\right)}_{(c)I,P}}_{(c)I,P} = -\underbrace{\frac{\partial}{\partial y_1} \underbrace{\left(a_{11}\right)}_{(b)I,P}.$$

Teniendo en cuenta la paridad de a_{11} y a_{22} , y por los resultados antes vistos para σ_1 y σ_2 , separando dicho producto, necesariamente $\frac{\partial N}{\partial y_1}$ debe ser par con respecto a y_1 , $\frac{\partial N}{\partial y_2}$ debe ser impar con respecto a y_1 , y ambas deben ser pares con respecto a y_2 . Esto quiere decir que la función N es impar con respecto a y_1 y par con respecto a y_2 .

$$(P,P)\left\{\sigma_1 = \underbrace{a_{11}}_{P,P} \underbrace{\frac{\partial}{\partial y_1}\left(N\right)}_{P,P}, \underbrace{a_{22}}_{P,P} \underbrace{\frac{\partial}{\partial y_2}\left(N\right)}_{I,I} = \sigma_2\right\}(I,I)$$

En particular, esto significa que, para cualquier valor de $y_2 = \xi \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$:

 $N(0,\xi) = 0,$

pero por otra parte $N(-\frac{1}{2},\xi) = -N(\frac{1}{2},\xi)$ y por la periodicidad $N(-\frac{1}{2},\xi) = N(\frac{1}{2},\xi)$. Por lo tanto

$$N(-\frac{1}{2},\xi) = N(\frac{1}{2},\xi) = 0$$

De forma similar se tienen condiciones para el flujo para $y_2 = \xi \in [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]$:

$$\sigma_2(\xi, 0) = \sigma_2(\xi, -\frac{1}{2}) = \sigma_2(\xi, \frac{1}{2}) = 0.$$

De los análisis anteriores queda claro entonces que, conociendo los valores de N en el primer cuadrante de la celda $([0, \frac{1}{2}]^2)$ es posible obtener (por paridad) los valores de dicha función en toda la celda $([-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^2)$. Además, las condiciones obtenidas permitirían definir el problema de contorno en dicha región.

De manera adicional es posible también obtener una nueva simplificación mediante el cambio de variables $M = N + y_1$, con el cual (B-5) se reduce a

$$\frac{\partial}{\partial y_1} \left(a_{11} \frac{\partial M}{\partial y_1} \right) + \frac{\partial}{\partial y_2} \left(a_{22} \frac{\partial M}{\partial y_2} \right) = 0.$$

Con dicho cambio de variables es necesario cambiar solo una de las condiciones en la frontera $M(\frac{1}{2},\xi) = 0$ (nótese que $\sigma_2 = a_{22}\frac{\partial N}{\partial y_2} = a_{22}\frac{\partial M}{\partial y_2}$). Las condiciones en la interfaz también necesitan ser modificadas, pero dichas modificaciones en realidad simplifican los cálculos.

Observación: El desarrollo presentado en esta sección es válido para cualquier medio simétrico respecto al eje y_2 (Fig. B-2 b), se consideraron inclusiones circulares solo por su fácil representación y delimitación.

B.2. Coefficientes suaves

Formalizaremos el resultado mostrado en la sección anterior para más dimensiones [3]. Denotaremos por S_h al operador de reflexión respecto al hiperplano $P_h = \{(y_1, \dots, y_n) : y_h = 0\},$ (es decir, S_h cambia el signo de la coordenada y_h):

$$S_h y = \left((-1)^{\delta_{h1}} y_1, \dots, (-1)^{\delta_{hn}} y_n \right)$$

(se ha usado la delta de Kronecker: $\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{si} & i = j \\ 0 & \text{si} & i \neq j \end{cases}$). Notemos la siguiente propiedad sobre la transformación S_h : para cualquier función diferenciable $\phi(\eta)$ se tiene que

$$\frac{\partial}{\partial y_j}\varphi\left(S_hy\right) = (-1)^{\delta_{hj}} \left.\frac{\partial\varphi}{\partial\eta_j}(\eta)\right|_{\eta = S_hy}.$$
(B-6)

Consideraremos que el tensor $A = (a_{ij})$ satisface una simetría de reflexión respecto al hiperplano P_h del tipo

$$a_{ij}(S_h y) = (-1)^{\delta_{hi}} + \delta_{hj} a_{ij}(y).$$
 (B-7)

Observación: Una condición necesaria para esta simetría es que, para los puntos $\xi \in P_h$:

$$a_{kh}(\xi) = a_{hk}(\xi) = 0, \qquad \forall k \neq h.$$
(B-8)

De manera similar, por la periodicidad, para $\xi' \in P'_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = \frac{1}{2}\}$:

$$a_{kh}(\xi') = a_{hk}(\xi') = 0, \qquad \forall k \neq h.$$
(B-9)

Lema 17. Sea A(y) simétrica respecto al hiperplano P_h en el sentido (B-7). Las soluciones del problema local (B-1)-(B-3) son impares respecto al hiperplano P_h y pares respecto al resto de

hiperplanos $P_{k\neq h}$, i.e.

$$N^{(j)}(S_h y) = (-1)^{\delta_{hj}} N^{(j)}(y).$$
(B-10)

Corolario 18. En particular, para los puntos $\xi \in P_h$:

$$N^{(h)}(\xi) = 0, (B-11)$$

y por la periodicidad (B-2), para todo $\xi' \in P'_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = \frac{1}{2}\}$:

$$N^{(h)}(\xi') = 0. (B-12)$$

Demostración. Para (B-11) basta observar que $N^{(h)}(\xi) \stackrel{=}{=} -N^{(h)}(\xi)$. De manera similar, de $N^{(h)}(\xi') \stackrel{=}{=} N^{(h)}(S_h\xi') \stackrel{=}{=} -N^{(h)}(\xi')$ se obtiene (B-12).

Teorema 19. Sea A(y) simétrica respecto al hiperplano P_h en el sentido (B-7). La propiedad efectiva del medio dada por (4-35) satisface

$$\hat{a}_{kh} = \hat{a}_{hk} = 0, \qquad \forall k \neq h. \tag{B-13}$$

Denotemos por $M^{(h)}(y) = N^{(h)}(y) + y_h$. El problema local (B-1)-(B-3) en la celda periódica ${\cal W}$ puede ser transformado en un problema en la celda

$$W^{(h)} = [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^{h-1} \times [0, \frac{1}{2}] \times [-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}]^{n-h}$$

de la forma

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij} \frac{\partial M^{(h)}}{\partial y_j} \right) = 0, \qquad \text{en } W^{(h)}, \qquad (B-14)$$

$$M^{(h)}(\xi) = 0, \qquad \forall \xi \in P_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = 0\}, \qquad (B-15)$$
$$M^{(h)}(\xi') = \frac{1}{\tau}, \qquad \forall \xi' \in P'_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = \frac{1}{\tau}\}, \qquad (B-16)$$

$$^{(h)}(\xi') = \frac{1}{2}, \qquad \forall \xi' \in P'_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = \frac{1}{2}\}, \qquad (B-16)$$

$$M^{(h)}$$
 $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right] - \text{periódica en } y_k \quad \forall k \neq h.$ (B-17)

Las condiciones (B-15) y (B-16) se obtienen de (B-11) y (B-12), respectivamente.

Teorema 20. Sea A(y) simétrica respecto al hiperplano P_h en el sentido (B-7) y sea $M^{(h)}$ solución del problema (B-14)-(B-17). La propiedad efectiva del medio dada por (4-35) satisface

$$\hat{a}_{hh} = 2 \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \dots \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} \left(\int_{0}^{\frac{1}{2}} a_{hj} \frac{\partial M_h}{\partial \xi_j} d\xi_h \right) \prod_{q \neq h} d\xi_q = 2 \left\langle a_{hj} \frac{\partial M^{(h)}}{\partial \xi_j} \right\rangle_{W^{(h)}}.$$
 (B-18)

Por último consideremos el caso donde (B-7) se satisface para toda $h = 1, \ldots, n$. Entonces, por el Teorema 19, el tensor de coeficientes efectivos es diagonal. Por otra parte en lugar de resolver los problemas en las celdas $W^{(h)}$, bastaría resolverlos sobre la regiónn $W^* = [0, \frac{1}{2}]^n$. De esta forma se obtiene el Problema Local Reducido de la forma

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij} \frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j} \right) = 0, \qquad \text{en } W^*, \tag{B-19}$$
$$M^{(k)}(\xi) = 0, \qquad \forall \xi \in P_k = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_k = 0\}, \tag{B-20}$$

$$) = 0, \qquad \forall \xi \in P_k = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_k = 0\}, \qquad (B-20)$$

$$M^{(k)}(\xi') = \frac{1}{2}, \qquad \forall \xi' \in P'_k = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_k = \frac{1}{2}\}.$$
(B-21)

$$a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}(\xi) = a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}(\xi') = 0 \qquad \forall \xi \in P_i, \xi' \in P'_i, i \neq k.$$
(B-22)

Eq. (B-22) se obtiene de

$$a_{ij}\frac{\partial M^{(h)}}{\partial y_j}\bigg|_{y_h=d} \stackrel{=}{\underset{(B-8)}{=}} a_{ii}\frac{\partial M^{(h)}}{\partial y_i}\bigg|_{y_i=d} = a_{ii}\frac{\partial N^{(h)}}{\partial y_i}\bigg|_{y_i=d} \stackrel{=}{\underset{L.17}{=}} 0. \qquad (d=0,\frac{1}{2})$$

Teorema 21. Sea A(y) con (B-7) para para toda $h = 1, \ldots, n$, y sea $M^{(k)}$ solución de (B-19)-(B-22). La propiedad efectiva del medio dada por (4-35) satisface

$$\hat{a}_{kk} = 2^n \int_0^{\frac{1}{2}} \dots \int_0^{\frac{1}{2}} a_{kj} \frac{\partial M^{(k)}}{\partial \xi_j} d\xi_1 \dots d\xi_n = 2^n \left\langle a_{kj} \frac{\partial M^{(k)}}{\partial \xi_j} \right\rangle_{W^*}.$$
 (B-23)

Observación: Por el Teorema 19 sabemos, además, que en ese caso el tensor es diagonal, por lo cual (B-23) nos brinda toda la información necesaria sobre el mismo.

Coeficientes discontinuos **B.3**.

Consideremos ahora un caso más general, donde la celda periódica está formada por dominios con una interfaz común en la que se imponen ciertas condiciones y en cuyos interiores la propiedad es continua (pudiera estar compuesta por diferentes materiales, contener líneas de fallas, etc.)

Consideraremos el Problema Local de la forma

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ik} + a_{ij} \frac{\partial N^{(k)}}{\partial y_j} \right) = 0, \quad \text{en } W \setminus \Gamma,$$
(B-24)

$$\left[\!\left[a_{ik} + a_{ij}\frac{\partial N^{(k)}}{\partial y_j}\right]\!\right] = 0 \qquad \text{sobre } \Gamma, \tag{B-25}$$

$$\left(a_{ik} + a_{ij}\frac{\partial N^{(k)}}{\partial y_j}\right) \cdot n = -\beta \left[\!\!\left[N^{(k)}\right]\!\!\right] \quad \text{sobre } \Gamma, \tag{B-26}$$

$$N^{(k)} W$$
 – periódica, (B-27)

$$\left\langle N^{(k)} \right\rangle_{W} = 0. \tag{B-28}$$

Donde $A(y) = (a_{ij}(y))$ es un tensor simétrico, W-periódico y definido positivo, y $\beta(\gamma)$ una función no negativa definida en Γ .

Observación: Para este nuevo problema se cumplen tanto el Lema 17 como el Teorema 19.

Adicionalmente, para $M^{(h)}(y) = N^{(h)}(y) + y_h$, se satisface (B-15)-(B-17) y la ecuación (B-14) se satisface en $W^{(h)} \setminus \Gamma$. De modo que el problema local (B-24)-(B-28) en la celda periódica Wpuede aún ser transformado en un problema en la celda $W^{(h)}$ si se añaden condiciones sobre la interfaz. Para ello basta notar que

$$\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j} = \frac{\partial N^{(k)}}{\partial y_j} + \delta_{kj}$$

y utilizando la continuidad de $\pi_k(y) = y_k$, se obtiene:

(1)

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij} \frac{\partial M^{(h)}}{\partial y_j} \right) = 0, \quad \text{en } W^{(h)} \setminus \Gamma,$$
(B-29)

$$\left[a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}\right] = 0 \qquad \text{sobre } \Gamma, \tag{B-30}$$

$$\left(a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}\right) \cdot n = -\beta \left[\!\!\left[M^{(k)}\right]\!\!\right] \qquad \text{sobre } \Gamma,\tag{B-31}$$

$$M^{(h)}(\xi) = 0, \qquad \forall \xi \in P_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = 0\},$$
(B-32)

$$M^{(h)}(\xi') = \frac{1}{2}, \qquad \forall \xi' \in P'_h = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_h = \frac{1}{2}\},$$
(B-33)

$$M^{(h)}$$
 $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ – periódica en $y_k \quad \forall k \neq h.$ (B-34)

Teorema 22. Sea A(y) simétrica respecto al hiperplano P_h en el sentido (B-7) y sea $M^{(h)}$ solución del problema (B-29)-(B-34). La propiedad efectiva del medio (4-35) satisface (B-18).

Para el caso en que (B-7) se satisface para toda h = 1, ..., n, con las condiciones propuestas en la interfaz, el Problema Local Reducido tiene la forma

$$\frac{\partial}{\partial y_i} \left(a_{ij} \frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j} \right) = 0 \qquad \text{en } W^* \setminus \Gamma, \tag{B-35}$$

$$\left[a_{ij} \frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j} \right] = 0 \qquad \text{sobre } \Gamma, \tag{B-36}$$

$$\left(a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}\right) = -\beta \left[\!\!\left[M^{(k)}\right]\!\!\right] \qquad \text{sobre } \Gamma,\tag{B-37}$$

$$M^{(k)}(\xi) = 0, \quad \forall \xi \in P_k = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_k = 0\},$$
(B-38)

$$M^{(k)}(\xi') = \frac{1}{2} \quad \forall \xi' \in P'_k = \{(y_1, \cdots, y_n) : y_k = \frac{1}{2}\},$$
(B-39)

$$a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}(\xi) = a_{ij}\frac{\partial M^{(k)}}{\partial y_j}(\xi') = 0 \qquad \forall \xi \in P_i, \xi' \in P'_i, i \neq k.$$
(B-40)

Teorema 23. Sea A(y) con (B-7) para toda h = 1, ..., n, y sea $M^{(k)}$ solución de (B-35)-(B-40). La propiedad efectiva del medio, dada por (4-35) es un tensor diagonal que satisface (B-23).

Apéndice C

Sobre la convergencia de sistemas infinitos

Los determinantes infinitos han sido estudiados en obras clásicas de Hill, Poincaré y Koch. Desde entonces han sido aplicados con éxito en la integración de ecuaciones diferenciales y la solución numérica de sistemas infinitos. Enunciaremos a continuación algunos de los resultados más relevantes de dicha teoría [151].

Sea la matriz infinita

$$C = \begin{pmatrix} 1 + c_{11}, & c_{12}, & c_{13}, & \cdots \\ c_{12}, & 1 + c_{22}, & c_{23}, & \cdots \\ c_{31}, & c_{32}, & 1 + c_{33}, & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$
(C-1)

se dice que dicha matriz es regular si para toda fila se cumple

$$s_i = \sum_{k=1}^{\infty} |c_{i,k}| < 1.$$

En particular, si existe una cota estricta s: $s_i \leq s < 1$, se dice que C es completamente regular.

Teorema 24 (Método de reducción). Sea $\{b_i\}_{i=1}^{\infty}$ una serie acotada y

$$x_i + \sum_{k=1}^{\infty} c_{i,k} x_k = b_i$$
 (i = 1, 2, ...) (C-2)

un sistema regular, si existe una constante K para la cual los términos independientes satisfacen

$$|b_i| < K\left(1 - \sum_{k=1}^{\infty} |c_{i,k}|\right)$$

entonces las soluciones de los sistemas finitos

$$x_i^{(N)} + \sum_{k=1}^N c_{i,k} x_k^{(N)} = b_i, \quad (i = 1, \dots, N).$$

convergen a la solución del sistema regular:

$$\lim_{N \to \infty} x_i^{(N)} = x_i$$

Sea una matriz infinita, si existe el límite de los determinantes de las submatrices de $N \times N$, cuando $N \to \infty$, a este límite se le conoce como determinante infinito. En particular, consideremos C en (C-1) y si, además, la serie doble es absolutamente convergente:

$$\sum_{i,j=1}^{\infty} |c_{ij}| < \infty,$$

se puede demostrar [202, 203] que dicho determinante existe. A este tipo de matrices infinitas y a su determinante se les conoce como *normales* [151].

Observación: Un sistema de la forma (C-2) cuya matriz es normal se puede convertir en un sistema completamente regular mediante normalización.

Sea la sucesión acotada $\{b_i\}_{i=1}^{\infty}$ y C una matriz normal con determinante $|C| = \Delta$, denotaremos por ${}^{(k)}\Delta$ al determinante que se obtiene al sustituir la columna k por dicha serie. Este determinante también existe y permite desarrollar una Regla de Cramer generalizada a sistemas infinitos.

Teorema 25 (regla de Cramer para sistemas normales). Sea el sistema infinito

$$x_i + \sum_{k=1}^{\infty} c_{i,k} x_k = b_i,$$

si la matriz C del sistema es normal y la sucesión $\{b_i\}$ es acotada:

1. Si $|C| = \Delta \neq 0$, el sistema posee una única solución acotada y está dada por:

$$x_i = \frac{{}^{(i)}\Delta}{\Delta}.$$

2. Si $\Delta = 0$, el sistema homogéneo ($b_i \equiv 0$) tendrá un número finito r de soluciones no nulas independientes (r es el rango del sistema infinito) y para que el sistema no homogéneo esté bien determinado se necesitan imponer r condiciones sobre los términos independientes b_i .

Corolario 26. Como los determinantes están definidos a partir de límites de sistemas menores, se puede afirmar que, para $\Delta \neq 0$, las soluciones del sistema finito truncado obtenidas por la regla de Cramer tienden a la solución del sistema infinito.

Existen otras condiciones para la existencia de determinantes que permiten aplicar la regla

de Cramer en sistemas no normales. Por ejemplo [151,204], bastaría con que se cumplan:

$$\sum_{i=1}^{\infty} |c_{ii}| < \infty, \quad \sum_{i,k=1}^{\infty} c_{ik}^2 < \infty \quad \mathbf{y} \ \sum_{i=1}^{\infty} b_i^2 < \infty,$$

(condiciones de Koch), permitiendo afirmar, además, que en dicho caso $\sum x_i^2 < \infty$. También es posible reemplazar la segunda condición por $|c_{ik}| < \alpha_i$ donde $\sum \alpha_i < \infty$.

C.1. Caso de interés

En la Sección 4.3 se obtuvo el sistema infinito (4-112) con incógnitas $a = (a_1, a_3, ...)^{\top}$ y vector independiente $v = (\beta_1 R^2, 0, 0, ...)^{\top}$. $\{v_j\}_{j=1}^{\infty}$ es una serie acotada, veamos que la matriz

$$M = \begin{pmatrix} 1 - \beta_1 R^2 \eta_{11} & \beta_1 R^2 \eta_{12} & \beta_1 R^2 \eta_{13} & \cdots \\ \beta_2 R^4 \eta_{21} & 1 - \beta_2 R^4 \eta_{22} & \beta_2 R^4 \eta_{23} & \cdots \\ \beta_3 R^6 \eta_{31} & \beta_3 R^6 \eta_{32} & 1 - \beta_3 R^6 \eta_{33} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

es normal.

De (4-106) sabemos que si $\rho = \frac{\alpha_2}{\alpha_1} < 1$

$$0 < \beta_k < 1,$$

y si $\rho > 1$

$$\beta_1 < \beta_k < 1.$$

Por otra parte, de (4-94)

$$|\eta_{kl}| = \frac{(k+l-1)!}{(k-1)!l!} |S_{k+l}|,$$

donde la sucesión S_{λ} está acotada [205].

Sea C una cota común para $|\beta_k| \neq |\eta_{kl}|$, entonces

$$\sum_{k,l=1}^{\infty} |\beta_k R^{2k} \eta_{kl}| \le C \sum_{k=1}^{\infty} 2^k R^{2k} < \infty,$$

siendo la matriz del sistema normal y es posible aplicar tanto el método de reducción como la regla de Cramer para sistemas normales.

Observación: En particular también se cumplen las condiciones de Koch, que garantizarían, una vez resuelto el sistema, una acotación de los coeficientes a_i . Esta acotación se utilizó como hipótesis para utilizar la ortogonalidad de $\{\cos(k\theta)\}_k$ en $L^2([-\pi,\pi])$, y encontrar el sistema a partir de (4-99) y (4-102).

Bibliografía

- E. Iglesias-Rodríguez, M. E. Cruz, J. Bravo-Castillero, R. Guinovart-Díaz, R. Rodríguez-Ramos, and L. D. Pérez-Fernández, "Formulation of the heat conduction equation for heterogeneous media with multiple spatial scales using reiterated homogenization," *Engenharia Térmica (Thermal Engineering)*, vol. 15, no. 1, pp. 96–102, 2016 DOI:10.5380/reterm.v15i1.62165.
- [2] E. Iglesias-Rodríguez, M. E. Cruz, and J. Bravo-Castillero, "Reiterated homogenization applied to heat conduction in heterogeneous media with multiple spatial scales and perfect thermal contact between the phases," *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, vol. 38, no. 4, pp. 1333–1343, 2016 DOI:10.1007/s40430-016-0497-7.
- [3] N. S. Bakhvalov and G. P. Panasenko, Homogenozation: Averaging Processes in Periodic Media. Kluwer Academic Publishers, 1989 DOI:10.1007/978-94-009-2247-1.
- [4] A. Bensoussan, J.-L. Lions, and G. Papanicolau, Asymptotic Analysis for Periodic Structures. Studies in Mathematics and its Applications, North-Holland Publishing Company, 1978 DOI:10.1115/1.3424588.
- M. F. Horstemeyer, Practical Aspects of Computational Chemistry: Methods, Concepts and Applications, ch. Multiscale Modeling: A Review, pp. 87–135. Springer Netherlands, 2010 DOI:10.1007/978-90-481-2687-3_4.
- S. Torquato, Random Heterogeneous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties, vol. 16 of Interdisciplinary Applied Mathematics. Springer Science+Business Media, 2002 DOI:10.1115/1.1483342.
- G. P. Panasenko, "Homogenization for periodic media: from microscale to macroscale," *Physics of Atomic Nuclei*, vol. 71, no. 4, pp. 681–694, 2008 DOI:10.1134/S106377880804008X.
- [8] M. H. Sadd, *Elasticity: Theory, Applications and Numerics*. Elsevier's Science and Technology, second ed., 2009 DOI:10.1016/B978-0-12-374446-3.X0001-6.
- [9] R. M. Mahamood, E. T. Akinlabi, M. Shukla, and S. Pityana, "Functionally graded material: An overview," in *Proceedings of the World Congress on Engineering*, WCE 2012, (London, UK), International Association of Engineers (IAENG), Jul. 4-6 2012.
- [10] H. Y. Douanla, Two-scale Convergence and Homogenization of Some Partial Differential Equations. Thesis, Chalmers University of Technology and University of Gothenburg, 2013.
- [11] T. Zhang, Y. Zhang, H. Zhu, and Z. Yan, "Experimental investigation and multilevel modeling of the effective thermal conductivity of hybrid micro-fiber reinforced cementitious composites at elevated temperatures," *Composite Structures*, vol. 256, p. 112988, 2021 DOI:10.1016/j.compstruct.2020.112988.
- [12] A. Ramírez-Torres, R. Rodríguez-Ramos, F. J. Sabina, C. García-Reimbert, R. Penta, J. Merodio, R. Guinovart-Díaz, J. Bravo-Castillero, A. Conci, and L. Preziosi, "The role of malignant tissue on the thermal distribution of cancerous breast," *Journal of Theoretical Biology*, vol. 426, pp. 152–161, 2017 DOI:10.1016/j.jtbi.2017.05.031.

- [13] D. A. Kennedy, T. Lee, and D. Seely, "A comparative review of thermography as a breast cancer screening technique," *Integrative Cancer Therapies*, vol. 8, no. 1, pp. 9–16, 2009 DOI:10.1177/1534735408326171.
- [14] P. Kapoor and S. V. A. V. Prasad, "Image processing for early diagnosis of breast cancer using infrared images," in *The 2nd International Conference on Computer and Automation Engineering*, 2010ICCAE, (Singapore), IEEE, Feb. 26–28 2010 DOI:10.1109/iccae.2010.5451827.
- [15] L. Bezerra, M. Oliveira, T. Rolim, A. Conci, F. Santos, P. Lyra, and R. Lima, "Estimation of breast tumor thermal properties using infrared images," *Signal Processing*, vol. 93, no. 10, pp. 2851–2863, 2013 DOI:10.1016/j.sigpro.2012.06.002.
- [16] A. Greco, "Numerical simulation and mathematical modeling of 2D multi-scale diffusion in lamellar nanocomposite," *Computational Materials Science*, vol. 90, pp. 203–209, 2014 DOI:10.1016/j.commatsci.2014.04.017.
- [17] B. Mortazavi, O. Benzerara, H. Meyer, J. Bardon, and S. Ahzi, "Combined molecular dynamicsfinite element multiscale modeling of thermal conduction in graphene epoxy nanocomposites," *Carbon*, vol. 60, pp. 356–365, 2013 DOI:10.1016/j.carbon.2013.04.048.
- [18] H. Shin, S. Yang, S. Chang, S. Yu, and M. Cho, "Multiscale homogenization modeling for thermal transport properties of polymer nanocomposites with kapitza thermal resistance," *Polymer*, vol. 54, no. 5, pp. 1543–1554, 2013 DOI:10.1016/j.polymer.2013.01.020.
- [19] A. R. Díaz, E. I. S. Flores, S. J. Yanez, D. A. Vasco, J. C. Pina, and C. F. Guzmán, "Multiscale modeling of the thermal conductivity of wood and its application to cross-laminated timber," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 144, pp. 79–92, 2019 DOI:10.1016/j.ijthermalsci.2019.05.016.
- [20] T. Clancy, S. Frankland, J. Hinkley, and T. Gates, "Multiscale modeling of thermal conductivity of polymer/carbon nanocomposites," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 49, no. 9, pp. 1555–1560, 2010 DOI:10.1016/j.ijthermalsci.2010.05.007.
- [21] S. A. Angayarkanni and J. Philip, "Review on thermal properties of nanofluids: Recent developments," Advances in Colloid and Interface Science, vol. 225, pp. 146–176, 2015 DOI:10.1016/j.cis.2015.08.014.
- [22] A. Vatani, P. L. Woodfield, and D. V. Dao, "A survey of practical equations for prediction of effective thermal conductivity of spherical-particle nanofluids," *Journal of Molecular Liquids*, vol. 211, pp. 712–733, 2015 DOI:10.1016/j.molliq.2015.07.043.
- [23] J. S. Jin and J. S. Lee, "Effects of aggregated sphere distribution and percolation on thermal conduction of nanofluids," *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, vol. 27, no. 1, pp. 173–178, 2013 DOI:10.2514/1.T3915.
- [24] J. J. Wang, R. T. Zheng, J. W. Gao, and G. Chen, "Heat conduction mechanisms in nanofluids and suspensions," *Nano Today*, vol. 7, no. 2, pp. 124–136, 2012 DOI:10.1016/j.nantod.2012.02.007.
- [25] A. M. Hassaan, "An investigation for the performance of the using of nanofluids in shell and tube heat exchanger," *International Journal of Thermal Sciences*, vol. 177, p. 107569, 2022 DOI:10.1016/j.ijthermalsci.2022.107569.
- [26] W. Evans, R. Prasher, J. Fish, P. Meakin, P. Phelan, and P. Keblinski, "Effect of aggregation and interfacial thermal resistance on thermal conductivity of nanocomposites and colloidal nanofluids," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 51, no. 5/6, pp. 1431–1438, 2008 DOI:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2007.10.017.
- [27] J. Eapen, R. Rusconi, R. Piazza, and S. Yip, "The classical nature of thermal conduction in nanofluids," *Journal of Heat Transfer*, vol. 132, no. 10, p. 102402, 2010 DOI:10.1115/1.4001304.

- [28] X. Jie, Y. Bo-Ming, and Y. Mei-Juan, "Effect of clusters on thermal conductivity in nanofluids," *Chinese Physics Letters*, vol. 23, no. 10, pp. 2819–2822, 2006 DOI:10.1088/0256-307x/23/10/053.
- [29] R. Prasher, P. E. Phelan, and P. Bhattacharya, "Effect of aggregation kinetics on the thermal conductivity of nanoscale colloidal solutions (nanofluid)," *Nano Letters*, vol. 6, no. 7, pp. 1529–1534, 2006 DOI:10.1021/nl060992s.
- [30] S. A. Putnam, D. G. Cahill, P. V. Braun, Z. Ge, and R. G. Shimmin, "Thermal conductivity of nanoparticle suspensions," *Journal of Applied Physics*, vol. 99, no. 8, p. 084308, 2006 DOI:10.1063/1.2189933.
- [31] X. Zhang, H. Gu, and M. Fujii, "Experimental study on the effective thermal conductivity and thermal diffusivity of nanofluids," *International Journal of Thermophysics*, vol. 27, no. 2, pp. 569–580, 2006 DOI:10.1007/s10765-006-0054-1.
- [32] J. W. Gao, R. T. Zheng, H. Ohtani, D. S. Zhu, and G. Chen, "Experimental investigation of heat conduction mechanisms in nanofluids. clue on clustering," *Nano Letters*, vol. 9, no. 12, pp. 4128–4132, 2009 DOI:10.1021/nl902358m.
- [33] N. S. Bakhvalov, "On the convergence of a relaxation method with natural constraints on the elliptic operator," USSR Computational Mathematics and Mathematical Physics, vol. 6, no. 5, pp. 101–135, 1966 DOI:10.1016/0041-5553(66)90118-2.
- [34] K. Z. Markov, *Heterogeneous Media: Modelling and Simulation*, ch. Elementary Micromechanics of Heterogeneous Media, pp. 1–162. Birkhauser, 1999.
- [35] J. Byström, Some Mathematical and Engineering Aspects of the Homogenization Theory. Thesis, Luleå University of Technology, 2002.
- [36] J. Byström, J. Helsing, and A. Meidell, "Some computational aspects of iterated structures," *Composites, Part B: Engineering*, vol. 32, no. 6, pp. 485–490, 2001 DOI:10.1016/S1359-8368(01)00033-6.
- [37] H. Mechkour, Homogénéisation et simulation numérique de structures piézoélectriques perforées et laminées. Thesis, Mathématiques Appliquées, Université de Marne-La-Vallée, 2004.
- [38] G. Z. Voyiadjis and P. I. Kattan, Mechanics of Composite Materials with MATLAB. Springer-Verlag, first ed., 2005 DOI:10.1007/3-540-27710-2.
- [39] D. Cioranescu and P. Donato, An Introduction to Homogenization. Lecture Series in Mathematics and its Applications, Oxford University Press, 1999.
- [40] I. Babuška, "Homogenization approach in engeneering," in 2nd International Symposium on Computing Methods in Applied Sciences and Engineering, Computing methods in applied sciences and engineering, (Versailles, France), Institut de Recherche d'Informatique et d'Automatique - IRIA Research Laboratory, Dec. 15–19 1975.
- [41] L. Rayleigh, "LVI. On the influence of obstacles arranged in rectangular order upon the properties of a medium," *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, vol. 34, no. 211, pp. 481–502, 1892 DOI:10.1080/14786449208620364.
- [42] D. Lukkassen and G. W. Milton, "On hierarchical structures and reiterated homogenization," in Proceedings of the International Conference in Honour of Jaak Peetre on his 65th Birthday, Jaak Peetre 65th, (Lund, Sweden), pp. 355–368, Walter de Gruyter, Berlin, Aug. 17–22 2002.
- [43] I. Babuška, "Solution of interface problems by homogenization. I," SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 7, no. 5, pp. 603–634, 1976 DOI:10.1137/0508071.
- [44] I. Babuška, "Solution of interface problems by homogenization. II," SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 7, no. 5, pp. 635–645, 1976 DOI:10.1137/0507049.

- [45] I. Babuška, "Solution of interface problems by homogenization. III," SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 8, no. 6, pp. 923–937, 1977 DOI:10.1137/0508071.
- [46] E. É. Sanchez-Palencia, "Comportements local et macroscopique d'un type de milieux physiques hétérogènes," *International Journal Of Engineering Science*, vol. 12, no. 4, pp. 331–351, 1974 DOI:10.1016/0020-7225(74)90062-7.
- [47] G. Allaire and M. Briane, "Multiscale convergence and reiterated homogenization," Proceedings of the Royal Society of Edinburgh, vol. 126, no. 2, pp. 297–342, 1996 DOI:10.1017/s0308210500022757.
- [48] G. Allaire, *Lecture Notes: Introduction to homogenization theory*. School on Homogenization, CEA-EDF-INRIA, 2010.
- [49] E. S. Nascimento, M. E. Cruz, and J. Bravo-Castillero, "Calculation of the effective thermal conductivity of multiscale ordered arrays based on reiterated homogenization theory and analytical formulae," *International Journal of Engineering Science*, vol. 119, pp. 205–216, 2017 DOI:10.1016/j.ijengsci.2017.06.023.
- [50] L. P. Mattos, M. E. Cruz, and J. Bravo-Castillero, "Finite element computation of the effective thermal conductivity of two-dimensional multi-scale heterogeneous media," *Engineering Computations*, vol. 35, no. 5, pp. 2107–2123, 2018 DOI:10.1108/ec-11-2017-0444.
- [51] H. Dong, X. Zheng, J. Cui, Y. Nie, Z. Yang, and Z. Yang, "High-order three-scale computational method for dynamic thermo-mechanical problems of composite structures with multiple spatial scales," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 169, pp. 95–121, 2019 DOI:10.1016/j.ijsolstr.2019.04.017.
- [52] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, L. D. Pérez-Fernández, and F. J. Sabina, "Reiterated homogenization of a heat conduction problem with interfacial thermal barrier," in *Exposición Internacional de Materiales Compuestos 2018*, EXPO MATCO 2018, (CDMX, México), MATCO Red, Sep. 20–21 2018 DOI:10.13140/RG.2.2.32512.69125.
- [53] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, L. D. Pérez-Fernández, and F. J. Sabina, "Reiterated homogenization applied to nanofluids with an interfacial thermal resistance," *International Journal for Multiscale Computational Engineering*, vol. 18, no. 3, pp. 361–384, 2020 DOI:10.1615/IntJMultCompEng.2020031351.
- [54] B. M. Tyson, R. K. A. Al-Rub, A. Yazdanbakhsh, and Z. Grasley, "A quantitative method for analyzing the dispersion and agglomeration of nano-particles in composite materials," *Composites Part B: Engineering*, vol. 42, no. 6, pp. 1395–1403, 2011 DOI:10.1016/j.compositesb.2011.05.020.
- [55] J. L. Bahr, E. T. Mickelson, M. J. Bronikowski, R. E. Smalley, and J. M. Tour, "Dissolution of small diameter single-wall carbon nanotubes in organic solvents?," *Chemical Communications*, no. 2, pp. 193–194, 2001 DOI:10.1039/b008042j.
- [56] V. A. Sinani, M. K. Gheith, A. A. Yaroslavov, A. A. Rakhnyanskaya, K. Sun, A. A. Mamedov, J. P. Wicksted, and N. A. Kotov, "Aqueous dispersions of single-wall and multiwall carbon nanotubes with designed amphiphilic polycations," *Journal of the American Chemical Society*, vol. 127, no. 10, pp. 3463–3472, 2005 DOI:10.1021/ja045670+.
- [57] W. Evans, J. Fish, and P. Keblinski, "Role of brownian motion hydrodynamics on nanofluid thermal conductivity," *Applied Physics Letter*, vol. 88, no. 9, pp. 09316–1–09316–3, 2006 DOI:10.1063/1.2179118.
- [58] C. F. Matt and M. E. Cruz, "Effective thermal conductivity of composite materials with 3-d microstructures and interfacial thermal," *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, vol. 53, no. 6, pp. 577–604, 2008 DOI:10.1080/10407780701678380.

- [59] C.-W. Nan, R. Birringer, D. R. Clarke, and H. Gleiter, "Effective thermal conductivity of particulate composites with interfacial thermal resistance," *Journal of Applied Physics*, vol. 81, no. 10, pp. 6692–6699, 1997 DOI:10.1063/1.365209.
- [60] E. Iglesias-Rodríguez, M. E. Cruz, J. Bravo-Castillero, R. Guinovart-Díaz, R. Rodríguez-Ramos, and L. D. Pérez-Fernández, "Formulation of the heat conduction equation for heterogeneous media with multiple spatial scales using reiterated homogenization," in 23rd International Congress of Mechanical Engineering, COBEM2015, (Rio de Janeiro, RJ, Brazil), Associação Brasileira de Engenharia e Ciéncias Mecânicas, Dic. 6–11 2015.
- [61] N. Meunier and J. Van Schaftingen, "Periodic reiterated homogenization for elliptic functions," *Journal de Mathématiques Pures et Appliquées*, vol. 84, no. 12, pp. 1716–1743, 2005 DOI:10.1016/j.matpur.2005.08.003.
- [62] D. Cioranescu and J. Saint-Jean Paulin, Homogenization of Reticulated Structures. Applied Mathematical Sciences, Springer, 1998 DOI:10.1007/978-1-4612-2158-6.
- [63] H. Brëzis, Análisis Funcional. Teoría y Aplicaciones, vol. 88 of Alianza Universidad. Alianza Editorial S.A., 1984.
- [64] E. Pippel, "Structure, composition and function of interfaces in ceramic fibre/matrix composites," Le Journal de Physique IV, vol. 03, no. C7, pp. C7.1905–C7.1910, 1993 DOI:10.1051/jp4:19937304.
- [65] S. T. Gu, L. Qin, and Q. Z. Zhu, "Variational principles and size-dependent bounds for piezoelectric inhomogeneous materials with piezoelectric spring–layer imperfect interfaces," *Smart Materials and Structures*, vol. 23, no. 5, pp. 055003.1–055003.11, 2014 DOI:10.1088/0964-1726/23/5/055003.
- [66] A. Báez, M.-A. Ramírez-Trocherie, A. Lobato, P. Padilla, R. Rodríguez-Ramos, and E. Iglesias-Rodríguez, "Modelling flow past a rough sphere via stream functions and solution through galerkin's method," *Archive of Applied Mechanics*, vol. 91, no. 5, pp. 1897–1905, 2021 DOI:10.1007/s00419-020-01860-7.
- [67] J.-L. Auriault and H. I. Ene, "Macroscopic modelling of heat transfer in composites with interfacial thermal barrier," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 37, no. 18, pp. 2885–2892, 1994 DOI:10.1016/0017-9310(94)90342-5.
- [68] Y. Benveniste and T. Chen, "On the saint-venant torsion of composite bars with imperfect interfaces," *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 457, no. 2005, pp. 231–255, 2001 DOI:10.1098/rspa.2000.0664.
- [69] Z. Hashin, "Thin interphase/imperfect interface in elasticity with application to coated fiber composites," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 50, no. 12, pp. 2509–2537, 2002 DOI:10.1016/s0022-5096(02)00050-9.
- [70] R. Rodríguez-Ramos, R. de Medeiros, R. Guinovart-Díaz, J. Bravo-Castillero, J. A. Otero, and V. Tita, "Different approaches for calculating the effective elastic properties in composite materials under imperfect contact adherence," *Composite Structures*, vol. 99, pp. 264–275, 2013 DOI:10.1016/j.compstruct.2012.11.040.
- [71] Y. Benveniste and T. Miloh, "Imperfect soft and stiff interfaces in two-dimensional elasticity," *Mechanics of Materials*, vol. 33, no. 6, pp. 309–323, 2001 DOI:10.1016/s0167-6636(01)00055-2.
- [72] J. C. López-Realpozo, R. Rodríguez-Ramos, R. Guinovart-Díaz, J. Bravo-Castillero, J. Otero, F. J. Sabina, F. Lebon, S. Dumont, and I. Sevostianov, "Effective elastic shear stiffness of a periodic fibrous composite with non-uniform imperfect contact between the matrix and the fibers," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 51, no. 6, pp. 1253–1262, 2014 DOI:10.1016/j.ijsolstr.2013.12.015.

- [73] S.-T. Gu and L. Qin, "Variational principles and size-dependent bounds for piezoelectric inhomogeneous materials with piezoelectric coherent imperfect interfaces," *International Journal* of Engineering Science, vol. 78, pp. 89–102, 2014 DOI:10.1016/j.ijengsci.2014.02.010.
- [74] B. E. Pobedrya, Mechanics of Composite Materials (in russian). Universidad Estatal de Moscú, 1984. ().
- [75] H. Mahiou and A. Béakou, "Modelling of interfacial effects on the mechanical properties of fibrereinforced composites," *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, vol. 29, no. 9-10, pp. 1035–1048, 1998 DOI:10.1016/s1359-835x(98)00090-6.
- [76] I. V. Andrianov, V. V. Danishevs'kyy, and A. L. Kalamkarov, "Micromechanical analysis of fiberreinforced composites on account of influence of fiber coatings," *Composites Part B: Engineering*, vol. 39, no. 5, pp. 874–881, 2008 DOI:10.1016/j.compositesb.2007.10.002.
- [77] R. Guinovart-Díaz, R. Rodríguez-Ramos, J. C. López-Realpozo, J. Bravo-Castillero, J. A. Otero, F. J. Sabina, F. Lebon, and S. Dumont, "Analysis of fibrous elastic composites with nonuniform imperfect adhesion," *Acta Mechanica*, vol. 227, no. 1, pp. 57–73, 2015 DOI:10.1007/s00707-015-1428-x.
- [78] R. P. A. Rocha and M. E. Cruz, "Computation of the effective conductivity of unidirectional fibrous composites with an interfacial thermal resistance," *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, vol. 39, no. 2, pp. 179–203, 2001 DOI:10.1080/10407780118981.
- [79] J. H. Lienhard IV and J. H. Lienhard V, A heat transfer textbook. Phlogiston Press, 3 ed., 2005.
- [80] P. Donato and S. Monsurró, "Homogenization of two heat conductors with an interfacial contact resistance," *Analysis and Applications*, vol. 2, no. 3, pp. 247–273, 2004 DOI:10.1142/s0219530504000345.
- [81] G. Allaire and K. El Ganaoui, "Homogenization of a conductive and radiative heat transfer problem," *Multiscale Modeling and Simulation*, vol. 7, no. 3, pp. 1148–1170, 2009 DOI:10.1137/080714737.
- [82] R. Lipton and B. Vernescu, "Composites with imperfect interface," Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, vol. 452, no. 1945, pp. 329–358, 1996 DOI:10.1098/rspa.1996.0018.
- [83] A. Gałka, J. J. Telega, and S. Tokarzewski, "Heat equation with temperature-dependent conductivity coefficients and macroscopic properties of microheterogeneous media," *Mathematical* and Computer Modelling, vol. 33, no. 8/9, pp. 927–946, 2001 DOI:10.1016/s0895-7177(00)00290-9.
- [84] R. Plunkett, "Damping mechanisms in fiber reinforced laminates," in Mechanics of Composite Materials (Z. Hashin and C. T. Herakovich, eds.), pp. 93–104, Pergamon, 1983 DOI:10.1016/B978-0-08-029384-4.50014-6.
- [85] R. M. Christensen, Mechanics of Composite Materials. Dover Publications, 2005.
- [86] E. Iglesias-Rodríguez, "Homogeneización reiterada en medios conductivos con contacto perfecto," Tesis, Facultad de Matemática y Computación, Universidad de la Habana, 2017 DOI:10.13140/RG.2.2.13340.62089.
- [87] E. De Giorgi, Selected Papers. Springer-Verlag, 2006 DOI:10.1007/978-3-642-41496-1_3.
- [88] S. Spagnolo, "Sulla convergenza di soluzioni di equazioni paraboliche ed ellittiche," Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa - Classe di Scienze, vol. 22, no. 4, pp. 571–597, 1968.
- [89] S. Spagnolo, "Convergence in energy for elliptic operators," in Numerical Solution of Partial Differential Equation III, SYNSPADE 1975, (University of Maryland, College Park, Maryland), Academic-Press Inc., May 19—24 1976.

- [90] G. Dal Maso, An Introduction to Γ-Convergence, vol. 8 of Progress in Nonlinear Differential Equations and Their Applications. Birkhäuser, 1993 DOI:10.1007/978-1-4612-0327-8.
- [91] T. Arbogast, J. Douglas, and U. Hornung, "Derivation of the double porosity model of single phase flow via homogenization theory," SIAM Journal on Mathematical Analysis, vol. 21, no. 4, pp. 823–836, 1990 DOI:10.1137/0521046.
- [92] D. Cioranescu, A. Damlamian, and G. Griso, "The periodic unfolding method in homogenization," SIAM Journal On Mathematical Analisys, vol. 40, no. 4, pp. 1585–1620, 2008 DOI:10.1137/080713148.
- [93] L. Tartar, The General Theory of Homogenization: A Personalized Introduction, vol. 7 of Lecture Notes of the Unione Matematica Italiana. Springer, 2009 DOI:10.1007/978-3-642-05195-1.
- [94] V. V. Zhikov, S. M. Kozlov, and O. Oleinik, Homogenization of Differential Operators and Integral Functionals. Encyclopaedia of Mathematical Sciences, Springer-Verlag, 1994 DOI:10.1007/978-3-642-84659-5.
- [95] D. Caillerie, T. Lévy, E. É. Sanchez-Palencia, P. M. Suquet, J. R. Willis, and A. Zaoui, *Homogenization Techniques for Composite Media*. Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, 1987 DOI:10.1007/3-540-17616-0.
- [96] M. E. Cruz and A. T. Patera, "A parallel monte-carlo finite-element procedure for the analysis of multicomponent random media," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 38, no. 7, pp. 1087–1121, 1995 DOI:10.1002/nme.1620380703.
- [97] Y. Zheng, Enhance Variational Asymptotic Method for Unit Cell Homogenization (VAMUCH) for Real Engineering Structures and Materials. Thesis, Utah State University, 2013.
- [98] J.-D. Benamou and Y. Brenier, "A computational fluid mechanics solution to the mongekantorovich mass transfer problem," *Numerische Mathematik*, vol. 84, no. 3, pp. 375–393, 2000 DOI:10.1007/s002119900117.
- [99] U. Hornung, Homogenization and Porous Media. Springer, 1997 DOI:10.1007/978-1-4612-1920-0.
- [100] Y. A. Mitropolsky and A. K. Lopatin, Nonlinear Mechanics, Groups and Symmetry, vol. 319 of Mathematics and Its Applications. Kluwer Academic Publishers, 1995 DOI:10.1007/978-94-015-8535-4.
- [101] G. Allaire and Z. Habibi, "Second order corrector in the homogenization of a conductive-radiative heat transfer problem," *Discrete and Continuous Dynamical Systems - Series B*, vol. 18, no. 1, pp. 1–36, 2012 DOI:10.3934/dcdsb.2013.18.1.
- [102] G. Allaire, "A brief introduction to homogenization and miscellaneous applications," in Mathematical and numerical approaches for multiscale problem (E. Cancès and S. Labbé, eds.), 37, pp. 1–49, ESAIM: PROCEEDINGS, Sep. 2012 DOI:10.1051/proc/201237001.
- [103] E. É. Sanchez-Palencia, Non-Homogeneous Media and Vibration Theory. Lecture Notes in Physics, Springer, Berlin, Heidelberg, 1984 DOI:10.1007/3-540-10000-8.
- [104] E. Cabib and G. Dal Maso, "On a class of optimum problems in structural design," Journal of Optimization Theory and Applications, vol. 56, no. 1, pp. 39–65, 1988 DOI:10.1007/bf00938526.
- [105] J.-F. Babadjian and M. Barchiesi, "A variational approach to the local character of G-closure: the convex case," Annales de L'Institut Henry Poincaré: Analyse non Linéare, vol. 26, no. 2, pp. 351–373, 2009 DOI:10.1016/j.anihpc.2007.08.002.
- [106] L. Evans, *Partial Differential Equations*. American Mathematical Society, 1997 DOI:10.1090/gsm/019.

- [107] S. C. Brenner and L. R. Scott, The Mathematical Theory of Finite Element Methods. Springer New York, 2008 DOI:10.1007/978-0-387-75934-0.
- [108] P. Grisvard, Elliptic Problems in Nonsmooth Domains. Pitman Advanced Pub. Program, 1985 DOI:10.1137/1.9781611972030.
- [109] R. A. Adams and F. J. J. F., Sobolev Spaces. Elsevier Science & Techn., 2 ed., 2003.
- [110] M. Chipot, Elliptic Equations: An Introductory Course. Birkhäuser Advanced Texts (BAT), Birkhäuser Verlag AG, 2009 DOI:10.1007/978-3-7643-9982-5.
- [111] O. A. Ladyzhenskaia, The boundary value problems of mathematical physics, vol. 49 of Applied Mathematical Sciences. Springer, New York, NY, 1985 DOI:10.1007/978-1-4757-4317-3.
- [112] J. L. Gómez-Muñoz and J. Bravo-Castillero, "Calculation of effective conductivity of 2D and 3D composite materials with anisotropic constituents and different inclusion shapes in Mathematica," *Computer Physics Communications*, vol. 179, no. 4, pp. 275–287, 2008 DOI:10.1016/j.cpc.2008.02.007.
- [113] G. López-Ruiz, J. Bravo-Castillero, R. Brenner, M. E. Cruz, R. Guinovart-Díaz, L. D. Pérez-Fernández, and R. Rodríguez-Ramos, "Variational bounds in composites with nonuniform interfacial thermal resistance," *Applied Mathematical Modelling*, vol. 39, no. 23/24, pp. 7266–7276, 2015 DOI:10.1016/j.apm.2015.02.048.
- [114] G. López-Ruiz, J. Bravo-Castillero, R. Brenner, M. E. Cruz, R. Guinovart-Díaz, L. D. Pérez-Fernández, and R. Rodríguez-Ramos, "Improved variational bounds for conductive periodic composites with 3D microstructures and nonuniform thermal resistance," *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, vol. 66, no. 5, pp. 2881–2898, 2015 DOI:10.1007/s00033-015-0540-z.
- [115] G. A. Evans, J. M. Blackledge, and P. D. Yardley, Analytic Methods for Partial Differential Equations, vol. 6 of Springer Undergraduate Mathematics. Springer London, 2 ed., 2001 DOI:10.1007/978-1-4471-0379-0.
- [116] S. Larsson and V. Thomée, Partial Differential Equations with Numerical Methods. Texts in Applied Mathematics, Springer, Berlin, Heidelberg, 2009 DOI:10.1007/978-3-540-88706-5.
- [117] R. C. Kirby, "From functional analysis to iterative methods," SIAM Review, vol. 52, no. 2, pp. 269–293, 2010 DOI:10.1137/070706914.
- [118] H. Attouch, G. Buttazzo, and G. Michaille, Variational Analysis in Sobolev and BV Spaces: Applications to PDEs and Optimization. SIAM, 2014 DOI:10.1137/1.9781611973488.
- [119] L. M. Sixto-Camacho, J. Bravo-Castillero, R. Brenner, R. Guinovart-Díaz, H. Mechkour, R. Rodríguez-Ramos, and F. J. Sabina, "Asymptotic homogenization of periodic thermo-magnetoelectro-elastic heterogeneous media," *Computers and Mathematics with Applications*, vol. 66, no. 10, pp. 2056–2074, 2013 DOI:10.1016/j.camwa.2013.08.027.
- [120] I. Babuška, "Error-bounds for finite element method," Numerische Mathematik, vol. 16, no. 4, pp. 322–333, 1971 DOI:10.1007/bf02165003.
- [121] R. O. Caballero Pérez, Homogeneización de Materiales Compuestos Periódicos Termo-Magneto-Electro-Elásticos. Tesis, Universidad Nacional Autónoma de México, 2021.
- [122] R. Lipton, "Heat conduction in fine scale mixtures with interfacial contact resistance," SIAM Journal on Applied Mathematics, vol. 58, no. 1, pp. 55–72, 1998.
- [123] J. R. Whiteman, The Mathematics of Finite Elements and Applications. Proceedings of the Brunel University Conference of the Institute of Mathematics and its Applications Held in April 1972. v. 1, Elsevier Inc, Academic Press, 1973 DOI:10.1016/C2013-0-11698-4.

- [124] P. G. Ciarlet, The Finite Element Method for Elliptic Problems, vol. 40. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2002 DOI:10.1137/1.9780898719208.
- [125] G. Birkhoff, M. H. Schultz, and R. S. Varga, "Piecewise hermite interpolation in one and two variables with applications to partial differential equations," *Numer. Math.*, vol. 11, no. 3, pp. 232–256, 1968 DOI:10.1007/bf02161845.
- [126] T. M. Apostol, Calculus. Vol. II: Multi-variable calculus and linear algebra, with applications to differential equations and probability., vol. XXI of A Blaisdell Book in Pure and Applied Mathematics. Wiley, 2nd ed., 1969.
- [127] C. Valdés Castro, Análisis de funciones de varias variables. UH Félix Varela, 2006.
- [128] Q. Ma and J. Cui, "Second-order two-scale analysis method for the heat conductive problem with radiation boundary condition in periodical porous domain," *Communications in Computational Physics*, vol. 14, no. 4, pp. 1027–1057, 2013 DOI:10.4208/cicp.290612.180113a.
- [129] Z.-H. Li, Q. Ma, and J. Cui, "Second-order two-scale finite element algorithm for dynamic thermo-mechanical coupling problem in symmetric structure," *Journal of Computational Physics*, vol. 314, pp. 712–748, 2016 DOI:10.1016/j.jcp.2016.03.034.
- [130] M. R. Cavallari, V. R. Zanchin, M. A. Valle, J. E. E. Izquierdo, E. M. Rodríguez, E. F. G. Rodríguez, M. A. Pereira-da Silva, and F. J. Fonseca, "On the performance degradation of poly(3-hexylthiophene) field-effect transistors," *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability*, vol. 15, no. 3, pp. 342–351, 2015 DOI:10.1109/TDMR.2015.2442239.
- [131] R. T. Coyle and J. A. Switzer, "Electrochemical synthesis of ceramic films and powders," 11 1989. US Patent 4,882,014.
- [132] L. Rassaei, E. Vigil, R. W. French, M. F. Mahon, R. G. Compton, and F. Marken, "Effects of microwave radiation on electrodeposition processes at tin-doped indium oxide (ito) electrodes," *Electrochimica Acta*, vol. 54, no. 26, pp. 6680–6685, 2009 DOI:10.1016/j.electacta.2009.06.062.
- [133] G. H. Paulino, E. C. N. Silva, and C. H. Le, "Optimal design of periodic functionally graded composites with prescribed properties," *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol. 38, no. 5, pp. 469–489, 2009 DOI:10.1007/s00158-008-0300-1.
- [134] H. M. Yin, G. H. Paulino, W. G. Buttlar, and L. Z. Sun, "Effective thermal conductivity of two-phase functionally graded particulate composites," *Journal of Applied Physics*, vol. 98, no. 6, pp. 063704.1–063704.9, 2005 DOI:10.1063/1.2039998.
- [135] F. E. Álvarez-Borges, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, R. Guinovart-Díaz, L. D. Pérez-Fernández, R. Rodríguez-Ramos, and F. J. Sabina, "Reiterated homogenization of a laminate with imperfect contact: gain-enhancement of effective properties," *Applied Mathematics and Mechanics*, vol. 39, no. 8, pp. 1119–1146, 2018 DOI:10.1007/s10483-018-2352-6.
- [136] M. Patrício, R. Mattheij, and G. de With, "Homogenisation with application to layered materials," *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 79, no. 3, pp. 288–305, 2008 DOI:10.1016/j.matcom.2007.12.001.
- [137] J.-L. Auriault, "Effective macroscopic description for heat conduction in periodic composites," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 26, no. 6, pp. 861–869, 1983 DOI:10.1016/S0017-9310(83)80110-0.
- [138] J. Bravo-Castillero, R. Rodríguez-Ramos, H. Mechkour, J. A. Otero, and F. J. Sabina, "Homogenization of magneto-electro-elastic multilaminated materials," *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, vol. 61, no. 3, pp. 311–332, 2008 DOI:10.1093/qjmam/hbn010.

- [139] M. E. Cruz, C. K. Ghaddar, and A. T. Patera, "A variational-bound nip-element method for geometrically stiff problems; application to thermal composites and porous media," *Proceedings* of The Royal Society, A: Mathematical Physical And Engineering Sciences, vol. 449, no. 1935, pp. 93–122, 1995 DOI:10.1098/rspa.1995.0034.
- [140] J. Bravo-Castillero, R. Rodríguez-Ramos, R. Guinovart-Díaz, H. Mechkour, R. Brenner, H. Camacho-Montes, and F. J. Sabina, "Universal relations and effective coefficients of magneto-electro-elastic perforated structures," *The Quarterly Journal of Mechanics and Applied Mathematics*, vol. 65, no. 1, pp. 61–85, 2012 DOI:10.1093/qjmam/hbr020.
- [141] D. Yañez-Olmos, J. Bravo-Castillero, A. Ramírez-Torres, R. Rodríguez-Ramos, and F. J. Sabina, "Effective coefficients of isotropic complex dielectric composites in a hexagonal array," *Technische Mechanik*, vol. 39, no. 2, pp. 220–228, 2019 DOI:10.24352/UB.OVGU-2019-020.
- [142] J. C. López-Realpozo, R. Rodríguez-Ramos, R. Guinovart-Díaz, J. Bravo-Castillero, and F. J. Sabina, "Transport properties in fibrous elastic rhombic composite with imperfect contact condition," *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 53, no. 2, pp. 98–107, 2011 DOI:10.1016/j.ijmecsci.2010.11.006.
- [143] R. Rodríguez-Ramos, F. J. Sabina, R. Guinovart-Díaz, and J. Bravo-Castillero, "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents – I. Elastic and square symmetry," *Mechanics of Materials*, vol. 33, no. 4, pp. 223–235, 2001 DOI:10.1016/s0167-6636(00)00059-4.
- [144] J. Bravo-Castillero, F. J. Sabina, R. Guinovart-Díaz, and R. Rodríguez-Ramos, "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents – II. piezoelectric and square symmetry," *Mechanics of Materials*, vol. 33, no. 4, pp. 237–248, 2001 DOI:10.1016/s0167-6636(00)00060-0.
- [145] A. I. Markushévich, Teoría de las funciones analíticas, vol. II. Mir, 1970.
- [146] M. Heins, "On the pseudoperiods of the weierstrass zeta functions," SIAM Journal on Numerical Analysis, vol. 3, no. 2, pp. 266–268, 1966 DOI:10.1137/0703020.
- [147] S. Zemel, "A direct evaluation of the periods of the weierstrass zeta function," Annali Dell'Universita' di Ferrara, vol. 60, no. 2, pp. 495–505, 2013 DOI:10.1007/s11565-013-0186-8.
- [148] K. Chandrasekharan, *Elliptic Functions*, ch. The zeta-function and the sigma-function of Weierstrass, pp. 48–57. Springer Berlin Heidelberg, 1985 DOI:10.1007/978-3-642-52244-4_4.
- [149] R. Stanley, Enumerative combinatorics, vol. 1 of Cambridge Studies in Advanced Mathematics. Cambridge University Press, 2 ed., 2012 DOI:10.1017/CBO9781139058520.
- [150] R. Grimaldi, Discrete and combinatorial mathematics : an applied introduction. Pearson Addison Wesley, 3 ed., 2004.
- [151] L. V. Kantorovich and V. I. Krylov, Approximate methods of higher analysis. Interscience Publishers, Inc., 1958 DOI:10.2307/2003014.
- [152] W. T. Perrins, D. R. McKenzie, and R. C. McPhedran, "Transport properties of regular arrays of cylinders," *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, vol. 369, no. 1737, pp. 207–225, 1979 DOI:10.1098/rspa.1979.0160.
- [153] R. Manteufel and N. Todreas, "Analytic formulae for the effective conductivity of a square or hexagonal array of parallel tubes," *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 37, no. 4, pp. 647–657, 1994 DOI:10.1016/0017-9310(94)90136-8.
- [154] R. L. Burden and J. D. Faires, Análisis numerico. International Thomson Learning, 2002.

- [155] Y. Saad, Iterative methods for sparse linear systems, vol. 82. SIAM, 2003 DOI:10.1137/1.9780898718003.
- [156] D. P. H. Hasselman and L. F. Johnson, "Effective thermal conductivity of composites with interfacial thermal barrier resistance," *Journal of Composite Materials*, vol. 21, no. 6, pp. 508–515, 1987 DOI:10.1177/002199838702100602.
- [157] Y. Benveniste, "A new approach to the application of mori-tanaka's theory in composite materials," *Mechanics of Materials*, vol. 6, no. 2, pp. 147–157, 1987 DOI:10.1016/0167-6636(87)90005-6.
- [158] M. Dunn and M. Taya, "Micromechanics predictions of the effective electroelastic moduli of piezoelectric composites," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 30, no. 2, pp. 161–175, 1993 DOI:10.1016/0020-7683(93)90058-f.
- [159] W. Jiajun and Y. Xiao-Su, "Effects of interfacial thermal barrier resistance and particle shape and size on the thermal conductivity of AlN/PI composites," *Composites Science and Technology*, vol. 64, no. 10-11, pp. 1623–1628, 2004 DOI:10.1016/j.compscitech.2003.11.007.
- [160] K. Pietrak and T. S. Wisniewski, "A review of models for effective thermal conductivity of composite materials," *Journal of Power Technologies*, vol. 95, no. 1, pp. 14–24, 2015.
- [161] R. S. Prasher and P. E. Phelan, "A scattering-mediated acoustic mismatch model for the prediction of thermal boundary resistance," *Journal of Heat Transfer*, vol. 123, no. 1, pp. 105–112, 2001 DOI:10.1115/1.1338138.
- [162] M. Zou, B. Yu, and D. Zhang, "An analytical solution for transverse thermal conductivities of unidirectional fibre composites with thermal barrier," *Journal of Physics D: Applied Physics*, vol. 35, no. 15, pp. 1867–1874, 2002 DOI:10.1088/0022-3727/35/15/309.
- [163] C. Jiang, Y. Xu, Y. Cheung, and S. Lo, "A rigorous analytical method for doubly periodic cylindrical inclusions under longitudinal shear and its application," *Mechanics of Materials*, vol. 36, no. 3, pp. 225–237, 2004 DOI:10.1016/s0167-6636(03)00010-3.
- [164] Y. A. Godin, "The effective conductivity of a periodic lattice of circular inclusions," Journal of Mathematical Physics, vol. 53, no. 6, pp. 063703.1–063703.15, 2012 DOI:10.1063/1.4726213.
- [165] Z. Hashin, "The spherical inclusion with imperfect interface," Journal of Applied Mechanics, vol. 58, no. 2, pp. 444–449, 1991 DOI:10.1115/1.2897205.
- [166] R. Guinovart-Díaz, J. Bravo-Castillero, R. Rodríguez-Ramos, and F. J. Sabina, "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents – I. Elastic and square symmetry," *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 33, no. 4, pp. 1445–1462, 2001 DOI:10.1016/s0167-6636(00)00059-4.
- [167] F. J. Sabina, R. Rodríguez-Ramos, J. Bravo-Castillero, and R. Guinovart-Díaz, "Closed-form expressions for the effective coefficients of a fiber-reinforced composite with transversely isotropic constituents – II. Piezoelectric and hexagonal symmetry," *Journal of the Mechanics and Physics* of Solids, vol. 33, no. 33, pp. 1463–1479, 2001 DOI:10.1016/s0167-6636(00)00060-0.
- [168] A. Ern and J.-L. Guermond, Theory and Practice of Finite Elements. Springer-Verlag Inc., 2004 DOI:10.1007/978-1-4757-4355-5.
- [169] H. Y. Ramírez and A. Santana, "Two interacting electrons confined in a 3d parabolic cylindrically symmetric potential, in presence of axial magnetic field: A finite element approach," *Computer Physics Communications*, vol. 183, no. 8, pp. 1654–1657, 2012 DOI:10.1016/j.cpc.2012.03.002.
- [170] F. Teixeira-Dias, R. J. de Alves de Sousa, R. A. F. Valente, and J. P. da Cruz, Método dos Elementos Finitos. ETEP - Edições Técnicas e Profissionais, first ed., 2010.

- [171] A. M. León Mecías, J. A. Mesejo Chiong, L. D. Pérez-Fernández, and J. Bravo-Castillero, "Computation of the effective conductivity of fibrous composites with imperfect thermal contact by combination of Asymptotic Homogenization, Domain Decomposition and Finite Elements Methods," *Defect and Diffusion Forum*, vol. 372, pp. 60–69, 2016 DOI:10.4028/www.scientific.net/DDF.372.60.
- [172] P. Le Tallec, "Domain decomposition methods in computational mechanics," Computational mechanics advances, vol. 1, no. 2, pp. 121–220, 1994.
- [173] P.-L. Lions, "On the schwarz alternating method. iii: a variant for nonoverlapping subdomains," in *Third international symposium on domain decomposition methods for partial differential equations*, 6, (Houston, Texas, USA), pp. 202–223, SIAM Philadelphia, PA, Mar. 20–22 1990.
- [174] F. Calabrò, "Numerical treatment of elliptic problems nonlinearly coupled through the interface," Journal of Scientific Computing, vol. 57, no. 2, pp. 300–312, 2013 DOI:10.1007/s10915-013-9706-z.
- [175] T. F. Chan and T. P. Mathew, "Domain decomposition algorithms," Acta Numerica, vol. 3, no. 1, pp. 61–143, 1994 DOI:10.1017/s0962492900002427.
- [176] A. Gaul, Recycling Krylov subspace methods for sequences of linear systems: Analysis and applications. Thesis, Technische Universität Berlin, Fakultät II - Mathematik und Naturwissenschaften, 2014 DOI:10.14279/depositonce-4147.
- [177] F. Hecht, "New development in FreeFEM++," Journal of Numerical Mathematics, vol. 20, no. 3-4, pp. 251–265, 2012 DOI:10.1515/jnum-2012-0013.
- [178] F. Hecht, FreeFEM++. Laboratoire Jacques-Louis Lions, Universit e Pierre et Marie Curie, Paris, 2017.
- [179] J. Gielis, "A generic geometric transformation that unifies a wide range of natural and abstract shapes," American Journal of Botany, vol. 90, no. 3, pp. 333–338, 2003 DOI:10.3732/ajb.90.3.333.
- [180] C. Geuzaine and J. F. Remacle, Gmsh Reference Manual: A three-dimensional finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities. Technical Report, 2007.
- [181] C. Geuzaine and J.-F. Remacle, "Gmsh: A 3-d finite element mesh generator with built-in pre-and post-processing facilities," *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, vol. 79, no. 11, pp. 1309–1331, 2009 DOI:10.1002/nme.2579.
- [182] G. Chatzigeorgiou, G. D. Seidel, and D. C. Lagoudas, "Effective mechanical properties of "fuzzy fiber" composites," *Composites Part B: Engineering*, vol. 43, no. 6, pp. 2577–2593, 2012 DOI:10.1016/j.compositesb.2012.03.001.
- [183] S. I. Kundalwal and M. C. Ray, "Micromechanical analysis of fuzzy fiber reinforced composites," *International Journal of Mechanics and Materials in Design*, vol. 7, no. 2, pp. 149–166, 2011 DOI:10.1007/s10999-011-9156-4.
- [184] G. Chatzigeorgiou, Y. Efendiev, and D. C. Lagoudas, "Homogenization of aligned "fuzzy fiber" composites," *International Journal of Solids and Structures*, vol. 48, no. 19, pp. 2668–2680, 2011 DOI:10.1016/j.ijsolstr.2011.05.011.
- [185] M. C. Ray, "A shear lag model of piezoelectric composite reinforced with carbon nanotubes-coated piezoelectric fibers," *International Journal of Mechanics and Materials in Design*, vol. 6, no. 2, pp. 147–155, 2010 DOI:10.1007/s10999-010-9118-2.
- [186] D. Guinovart-Sanjuán, "Homogeneización de estructuras regulares," Tesis, Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, 2013.

- [187] D. Tsalis, G. Chatzigeorgiou, and N. Charalambakis, "Homogenization of structures with generalized periodicity," *Composites Part B: Engineering*, vol. 43, no. 6, pp. 2495–2512, 2012 DOI:10.1016/j.compositesb.2012.01.054.
- [188] D. Guinovart-Sanjuán, K. Vajravelu, R. Rodríguez-Ramos, R. Guinovart-Díaz, J. Bravo-Castillero, F. Lebon, and F. Sabina, "Analysis of effective elastic properties for shell with complex geometrical shapes," *Composite Structures*, vol. 203, pp. 278–285, 2018 DOI:10.1016/j.compstruct.2018.07.036.
- [189] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, J. Mesejo-Chiong, and L. D. Pérez-Fernández, "Finite element and domain decomposition methods in fibrous composites via asymptotic homogenization," in 5th Brazilian Conference on Composite Materials, BCCM 5, (São Carlos, SP, Brazil), CNPq, Jul. 21–24 2020 DOI:10.13140/RG.2.2.14992.12800.
- [190] D. P. H. Hasselman and L. F. Johnson, "Effective thermal conductivity of composites with interfacial thermal contact resistance," in 10th Annual Conference on Composites and Advanced Ceramic Materials: Ceramic Engineering and Science Proceedings, Volume 7, Issue 7/8, pp. 1011–1013, John Wiley & Sons, Inc., 1987 DOI:10.1002/9780470320341.ch32.
- [191] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, J. Mesejo-Chiong, and L. D. Pérez-Fernández, "The interfacial thermal resistance in composites accounted by the reiterated homogenization and finite element methods," in 25th International Congress of Theoretical and Applied Mechanics, ICTAM 2021, (Milan, Italy), International Union of Theoretical and Applied Mechanics, Aug. 22–27 2021.
- [192] E. Iglesias-Rodríguez, J. Bravo-Castillero, M. E. Cruz, and J. Mesejo-Chiong, "Reiterated homogenization for conductive media with interfacial resistance: a fem+ddm based approach," in *1ra Conferência Ibero-Americana de Materiais Compósitos 2021*, IAMaC 2021, (Porto, Portugal), Universidade do Porto, Jul. 29–30 2021.
- [193] O. Cruz-González, R. Rodríguez-Ramos, J. Otero, A. Ramírez-Torres, R. Penta, and F. Lebon, "On the effective behavior of viscoelastic composites in three dimensions," *International Journal of Engineering Science*, vol. 157, p. 103377, 2020 DOI:10.1016/j.ijengsci.2020.103377.
- [194] R. Bunoiu and C. Timofte, "On the homogenization of a two-conductivity problem with flux jump," *Communications in Mathematical Sciences*, vol. 15, no. 3, pp. 745–763, 2017 DOI:10.4310/cms.2017.v15.n3.a8.
- [195] R. Taha, "Propagation of electromagnetic Alexandre and Η. waves innonhomogeneous media," Applications of Mathematics, vol. 49,no. 201 - 225,3, pp. 2004 DOI:10.1023/b:apom.0000042363.25402.0c.
- [196] H. T. Banks, V. A. Bokil, D. Cioranescu, N. L. Gibson, G. Griso, and B. Miara, "Homogenization of periodically varying coefficients in electromagnetic materials," *Journal of Scientific Computing*, vol. 28, no. 2-3, pp. 191–221, 2006 DOI:10.1007/s10915-006-9091-y.
- [197] Z. Hashin, "Thermoelastic properties of fiber composites with imperfect interface," Mechanics of Materials, vol. 8, no. 4, pp. 333–348, 1990 DOI:10.1016/0167-6636(90)90051-g.
- [198] G. Allaire, M. Palombaro, and J. Rauch, "Diffractive behavior of the wave equation in periodic media: weak convergence analysis," *Annali di Matematica*, vol. 188, no. 4, pp. 561–589, 2009 DOI:10.1007/s10231-008-0089-y.
- [199] G. Allaire, M. Palombaro, and J. Rauch, "Diffraction of bloch wave packets for maxwell's equations," *Communications in Contemporary Mathematics*, vol. 15, no. 6, pp. 1–36, 2013 DOI:10.1142/S0219199713500405.
- [200] Y. Capdeville, L. Guillot, and J.-J. Marigo, "1-d non-periodic homogenization for the seismic wave equation," *Geophysical Journal International*, vol. 181, no. 2, pp. 897–910, 2010 DOI:10.1111/j.1365-246X.2010.04529.x.

- [201] R. Caballero-Pérez, J. Bravo-Castillero, L. Pérez-Fernández, R. Rodríguez-Ramos, and F. Sabina, "Homogenization of thermo-magneto-electro-elastic multilaminated composites with imperfect contact," *Mechanics Research Communications*, vol. 97, pp. 16–21, 2019 DOI:10.1016/j.mechrescom.2019.04.005.
- [202] J.-C. Cortés, L. Jódar, F. J. Solís, and R. Ku-Carrillo, "Infinite matrix products and the representation of the matrix gamma function," *Abstract and Applied Analysis*, vol. 2015, pp. 1–8, 2015 DOI:10.1155/2015/564287.
- [203] F. Bornemann, "On the numerical evaluation of fredholm determinants," Mathematics of Computation, vol. 79, no. 270, pp. 871–915, 2009 DOI:10.1090/s0025-5718-09-02280-7.
- [204] L. V. Kantorovich, "Functional analysis and applied mathematics," Uspekhi Mat. Nauk, vol. 3, no. 6, pp. 89–185, 1948.
- [205] Y. Espinosa-Almeyda, R. Rodríguez-Ramos, H. Camacho-Montes, R. Guinovart-Díaz, and F. J. Sabina, "Elliptic functions and lattice sums for effective properties of heterogeneous materials," *Continuum Mechanics and Thermodynamics*, vol. 33, no. 4, pp. 1621–1636, 2021 DOI:10.1007/s00161-021-00997-2.