

# *Microestructuras Mecánicas*

POR PABLO PEDREGAL TERCERO \*

Recibido: 4 de Diciembre de 1991

*Presentado por el Académico Correspondiente D. J.I. Díaz Díaz*

## **1. INTRODUCCIÓN**

El Cálculo de Variaciones ha proporcionado a lo largo de su historia herramientas y técnicas muy adecuadas para tratar de describir configuraciones estables de determinados sistemas físicos. En particular, el propio planteamiento intrínseco del Cálculo de Variaciones asegura su papel fundamental en la descripción del comportamiento de los sólidos elásticos ante determinadas condiciones ambientales, pues experimentalmente dichas configuraciones no son sino la respuesta del material a variaciones de temperatura o a condiciones de frontera mecánicas, en una búsqueda inevitable de la menor energía disponible al sistema bajo esas determinadas condiciones. En los modelos abstractos de tales situaciones, se postula la existencia de una función de energía interna, propia del material que se estudia, y que es a su vez función del gradiente de deformación y de la temperatura. La posibilidad o no de estados estables o de mínima energía para el sólido está íntimamente relacionada con las propiedades de convexidad de la propia función de energía interna; de manera que si hay suficiente regularidad en este sentido, entonces puede probarse matemáticamente y comprobarse experimentalmente que existen estados o configuraciones de mínima energía. Esto corresponde a la teoría clásica y a los problemas que podríamos llamar "bien planteados". Mucho se ha escrito bajo estas hipótesis de regularidad o convexidad, de modo que podemos afirmar con propiedad que entendemos el mecanismo de minimización bajo tales condiciones. Con ello no queremos decir que esté todo dicho, ni es nuestra intención pretender cerrar estas cuestiones. Pero en este trabajo se intentó ir más allá en la comprensión de fenómenos mecánicos en sólidos para los que no están garantizadas estas hipótesis de convexidad. Es más, los funcionales de energía asociados con determinados sólidos cristalinos no presentan ninguna propiedad de convexidad en

---

\* Dpto. de Matemática Aplicada. Facultad de Ciencias Matemáticas. Universidad Complutense.

ningún sentido razonable, y, matemáticamente, esta total ausencia de regularidad es la responsable del comportamiento de estos cristales. La Naturaleza es a veces tan compleja y exigente que obliga al hombre a superarse sin cesar en su modo de entenderla, controlarla y manipularla.

A primera vista puede parecer una afirmación un tanto gratuita al asegurar que las funciones de energía de determinados cristales no son convexas ni siquiera en un sentido amplio que explicaremos en breve, y por tanto que los funcionales asociados no son semicontínuos inferiormente en las topologías débiles, propiedad que asegura el éxito de los métodos clásicos o directos del Cálculo de Variaciones. Tal hecho podría requerir el conocimiento exhaustivo de las funciones de energía, conocimiento que es imposible incluso en sistemas físicos simplificados. No obstante, se puede llegar a tal conclusión simplemente teniendo en cuenta las restricciones a que, desde el punto de vista real, debe estar sometida la función de energía interna. Nos referimos por un lado a la invarianza de observador, o independencia respecto del sistema de referencia inercial, y por otro a la invarianza debida a las simetrías propias del cristal que consideramos. Esta última característica es exclusiva de los sólidos reticulados y depende de la red cristalina en la que se organizan los átomos de un determinado cristal. Conocer esta invarianza es suficiente para poder explicar y predecir cualitativa y cuantitativamente el comportamiento del cristal, y en particular concluir que, al traducir esa invarianza a la función de energía, ésta no puede ser convexa, según hemos apuntado. Las consecuencias de este fenómeno son impresionantes.

Matemáticamente, no es complicado comprobar que en tales situaciones no existen estados de mínima energía. Esto puede sonar un tanto paradójico al no especialista y despertar una actitud más bien escéptica, pues de hecho casi todo sistema físico real dejado a sí mismo alcanza antes o después un estado estable de equilibrio, y los cristales no son ninguna excepción a esta regla que la experiencia nos ha enseñado como intuitiva. Pero en la idealización que supone todo modelo matemático de la realidad siempre hay factores que escapan a nuestro control, sin que ello quiera significar nuestra incapacidad de poder acercarnos a una comprensión adecuada. Lo importante es ser consciente de esta limitación, y no cerrarse a posteriores revisiones de los modelos cuando se quiera afinar más o nuevas experiencias, progresos o desarrollos así lo exijan. En otros contextos similares en que un sistema físico busca inconscientemente un estado deseable que no existe se ha hablado de frustración, y es un término que heurísticamente explica muy bien la actitud del cristal. ¿Cómo se comporta pues el sólido cristalino sometido a condiciones ambientales concretas buscando esa mínima energía que en teoría no puede alcanzar?. Físicamente, estamos hablando de un fenómeno de transiciones de fase, y se ha observado que el cristal desarrolla una "microestructura" interna muy fina con propiedades cuantitativas específicas del material. Estas propiedades y algunas de sus consecuencias se han obtenido con anterioridad mediante la teoría cristalográfica clásica de materiales, y se recuperan también con una exactitud y facilidad asombrosas mediante este planteamiento energético o variacional.

¿Cómo encajan todos estos hechos en el modelo matemático?; y sobre todo, ¿cómo se pueden explicar, entender y manipular esas microestructuras que el cristal desarrolla naturalmente en su afán por encontrar la mínima energía?. Esto se ha conseguido teóricamente de una manera muy elegante a través del concepto de medida de Young o medida parametrizada. El camino resulta natural, por lo menos a posteriori. Puesto que la teoría clásica no puede explicar este fenómeno de frustración porque no existen estados minimizadores de la energía, ampliemos el conjunto de "posibles" estados para poder incluir esas microestructuras que de hecho prefieren los cristales frente a otras configuraciones admisibles. Así se habla de medidas de Young soluciones o medidas de Young minimizadores. Se trata simplemente de un mecanismo para resumir las propiedades de una sucesión de estados del sistema cuyas energías tienden a esa mínima energía disponible pero que no es alcanzable mediante un estado admisible. A tal sucesión se le denomina sucesión minimizante del problema, y la microestructura interna no es más que el salto cada vez más brusco según avanzamos en la sucesión de estados minimizantes, entre varias fases estables del cristal. Lo que se consigue resolver así son problemas patológicos o mal planteados desde el punto de vista clásico.

Detrás de estas cuestiones empieza a haber una teoría matemática coherente y profunda a la que, creemos, nuestra aportación ha enriquecido en algunos aspectos. Muchos son los científicos de todo el mundo que han trabajado en estos temas y han hecho posible el uso del Cálculo de Variaciones al estudio de transiciones de fase. Especial mención merece el grupo *Transiciones y Defectos en Materiales Ordenados* originado en la Universidad de Minnesota y repartido ahora por todo EE.UU. Los principales trabajos de este grupo y de otros científicos se encuentran en las referencias.

La importancia de este mecanismo de las medidas de Young es grande. Aunque originalmente fueron concebidas por Young en el contexto del Cálculo de Variaciones como generalización del concepto de minimizador de un problema, tal y como hemos apuntado, se están usando con éxito en el estudio de ecuaciones en derivadas parciales no lineales. Y es de esperar que su importancia en este campo se vea ampliada en el futuro.

## 2. CONTEXTO GENERAL

**2.1. Principios Variacionales.** Ahora es el momento de plasmar y expresar todo lo que hemos dicho en la introducción en lenguaje matemático. Imaginemos que un determinado sólido ocupa una configuración de referencia  $\Omega$  en el espacio físico  $\mathbf{R}^3$ . Lo que queremos decir con esto es que identificamos el lugar que ocupa el sólido con la región del espacio  $\Omega$ . Un determinado estado de dicho material viene entonces descrito por una función vectorial definida en  $\Omega, u : \Omega \rightarrow \mathbf{R}^3$ , a la que llamamos deformación. Su gradiente o matriz jacobiana  $\nabla u$  es el gradiente de deformación y representa la razón infinitesimal local de deformación a la que está sometida el sólido. Si  $W : \mathbf{M} \rightarrow \mathbf{R}$  representa la función energía

interna, donde  $\mathbf{M}$  es el espacio de matrices de modo que  $\nabla u \in \mathbf{M}$ , entonces la integral

$$\int_{\Omega} W(\nabla u(x)) dx$$

sería la energía asociada a la configuración determinada por  $u$ . En realidad,  $W$  tendría que depender de la temperatura  $\theta$ , pero imaginando que mantenemos  $\theta$  constante en todo el proceso podemos eliminar esta dependencia por simplicidad. Las condiciones ambientales las expresamos conceptualmente del siguiente modo. Llamamos una deformación,  $u$ , admisible si pertenece a un determinado conjunto de funciones fijado de antemano. Típicamente un tal conjunto de estados admisibles es

$$A = \{u \in H^{1,\infty}(\Omega, \mathbf{R}^3) : u(x) = u_0(x), x \in \partial\Omega \text{ y } \det \nabla u > 0\}.$$

Aquí,  $H^{1,\infty}(\Omega, \mathbf{R}^3)$  es el espacio de funciones Lipschitz por conveniencias técnicas y lo que estamos haciendo al considerar  $A$  como espacio de configuraciones es fijando como han de ser esos estados en la frontera del sólido. De algún modo el medio ambiente está interaccionando con el material y obligándole a mantenerse limitado dentro de la región  $u_0(\Omega)$  donde  $u_0$  es una deformación admisible, dada a priori y que modeliza esas condiciones ambientales. Finalmente la condición  $\det \nabla u > 0$  es una condición para evitar interpenetración de materia. En este contexto el principio variacional de minimización de energía es encontrar estados del sistema de manera que la integral de energía interna sea lo más pequeña posible. Es decir, simbólicamente se trata de encontrar  $v \in A$  de modo que

$$\int_{\Omega} W(\nabla v(x)) dx = \min_{u \in A} \int_{\Omega} W(\nabla u(x)) dx$$

Está claro que el material buscará irremediablemente un tal estado  $v$  frente a cualquier otro que presente mayor energía.

A partir de ahora se trata de estudiar un problema abstracto del Cálculo de Variaciones y nos olvidamos por el momento de lo que representa físicamente. Se ha de entender teóricamente cómo funciona el sistema de minimización y describir propiedades de los minimizadores, para después volver a los experimentos, comparar con las predicciones y decidir hasta qué punto es válido el modelo. Así, podremos basarnos en él en futuras situaciones sin necesidad de recurrir a experimentos y prever cómo se comportaría el material ante determinadas circunstancias que pueden interesar para condiciones más sofisticadas o para hacer uso tecnológico de estos conocimientos. Esto es en verdad "conocer" el mecanismo interno de funcionamiento del material.

**2.2. Quasiconvexidad y convexidad de rango uno.** Al contemplar el problema de minimización que hemos planteado, la primera pregunta que se le ocurre a un matemático, la primera que hay que resolver y en la que nos vamos a concentrar, es en qué condiciones existe un estado preferible; o dicho de otro modo, cuándo existen minimizadores de la integral de energía. Esto depende dramáticamente de las propiedades de la propia función  $W$ . De hecho se provó hace ya alrededor de 30 años (Morrey [36]) que la condición necesaria y suficiente para que existan estados admisibles minimizadores es que  $W$  sea quasiconvexa. Esto significa que para cada  $F \in M$ ,

$$(2.1) \quad W(F) \leq \frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} W(F + \nabla \xi(x)) dx$$

cualquiera que sea la función test  $\xi$ . Por tanto el problema está bien planteado si la función  $W$  es regular, lo cual tomaremos de aquí en adelante como sinónimo de quasiconvexa.

El modo en el que, bajo esta condición de regularidad, se demuestra que existen de hecho estados óptimos desde el punto de vista energético se llama método directo del Cálculo de Variaciones, y consiste en esencia en lo siguiente. En primer lugar se comprueba que la energía no puede decrecer indefinidamente. Esto normalmente se consigue a través de propiedades de acotación de la propia función de energía  $W$ . A continuación se toma una sucesión minimizante de estados. Esto no es sino una elección sucesiva de estados admisibles del sistema cuyas energías asociadas convergen a la mínima energía posible. En condiciones normales esta sucesión de estados "converge" a un nuevo estado admisible para el sistema. Y bajo la hipótesis de regularidad de  $W$  se obtiene que este estado límite tiene asociada la energía más pequeña posible para el sólido. Mientras que si falla esta regularidad la energía de este estado límite puede ser mucho mayor que la mínima energía disponible, con lo que no será un estado buscado por el sistema.

Como anunciamos, pretendemos centrarnos en problemas en los que la situación típica es esta última: disponemos de sucesiones de estados minimizantes pero no de estados minimizadores. Sin embargo, decidir si la propiedad (2.1) más arriba es cierta para una función de energía es tarea ardua y en la mayor parte de los casos no triviales, casi imposible ni siquiera con la ayuda de potentes ordenadores. La dificultad fundamental es que la condición (2.1) es una condición global y no local como sucede con la noción usual de convexidad. No obstante, de (2.1) se puede derivar una condición local que es mucho más manejable, por lo menos numérica y conceptualmente. Cuando una función  $W$  verifica esta otra condición decimos que es convexa de rango uno, y esto significa

$$W(\lambda A + (1 - \lambda) B) \leq \lambda W(A) + (1 - \lambda) W(B),$$

siempre que  $\lambda \in [0,1]$  y  $A$  y  $B$  son matrices cuya diferencia  $A - B$  es una matriz de rango uno. De aquí el nombre. Para nosotros tendrá mayor importancia la noción de convexidad de rango uno, que no la de quasiconvexidad, según veremos en breve. Como se ha observado, es fácil comprobar, y lo haremos implícitamente, que si  $W$  es quasiconvexa, entonces es convexa de rango uno. Lo que todavía es un problema abierto desde hace muchos años es si el recíproco es también cierto. O dicho de otro modo, si quasiconvexidad y convexidad de rango uno es lo mismo. Poder comprobar esto sería un avance de consecuencias aún imprevisibles.

**2.3. Medidas de Young gradientes.** El concepto de medida parametrizada o medida de Young fue introducido por Young, precisamente en el mismo contexto en que lo vamos a usar nosotros. Su idea fue la de poder generalizar el concepto de minimizador de un principio variacional para poder incluir y estudiar estos problemas en que la función de energía no es regular y faltan minimizadores en el sentido clásico. Conceptualmente la idea de medida parametrizada resuelve la siguiente cuestión. Imaginemos que tenemos una sucesión de funciones vectoriales  $v^n : \Omega \subset \mathbf{R}^p \rightarrow \mathbf{R}^q$  uniformemente acotada en  $L^\infty(\Omega)$  de modo que si  $\varphi : \mathbf{R}^q \rightarrow \mathbf{R}$  es continua, las composiciones  $\varphi(v^n)$  constituyen una nueva sucesión uniformemente acotada en  $L^\infty(\Omega)$  y en particular alguna subsucesión converge débilmente \* a algo. ¿Qué es este algo?. A la sucesión inicial se le puede asociar una medida parametrizada que es una familia de medidas de probabilidad  $\{v_x\}_{x \in \Omega}$  que tiene precisamente la propiedad

$$\varphi(v^n) \xrightarrow{*} \bar{\varphi} \text{ en } L^\infty(\Omega)$$

donde

$$\bar{\varphi}(x) = \int_{\mathbf{R}^q} \varphi(y) dv_x(y), \quad x \in \Omega$$

O sea que la medida parametrizada asociada a la sucesión  $v^n$  responde al problema de la convergencia débil.

En el caso particular del Cálculo de Variaciones la sucesión  $v^n$  es la sucesión de las gradientes  $\nabla u^n$  donde  $u^n : \Omega \subset \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{R}^3$ , y la medida parametrizada asociada se llama medida de Young gradiente. Si ahora disponemos de una sucesión minimizante para un principio variacional  $\nabla u^n$ , llamamos medida de Young gradiente minimizador a la medida parametrizada generada por esta sucesión minimizante,  $\{v_x\}_{x \in \Omega}$ , que por la propiedad de convergencia anterior para  $\varphi = W$ .

$$W(\nabla u^n) \xrightarrow{*} \bar{W} \text{ en } L^\infty(\Omega)$$

con

$$\bar{W}(x) = \int_M W(A) dv_x(A), \quad x \in \Omega.$$

En particular

$$\int_{\Omega} W(\nabla u^n) dx \rightarrow \int_{\Omega} \int_M W(A) dv_x(A) dx$$

de modo que la integral

$$\int_{\Omega} \int_M W(A) dv_x(A) dx$$

es precisamente la mínima energía disponible. En este sentido decimos que la propia medida de Young gradiente,  $\{v_x\}_{x \in \Omega}$ , es un minimizador del problema de energía. En las integrales anteriores  $M$  representa el espacio de matrices  $3 \times 3$  donde se mueven los gradientes  $\nabla u^n$ .

El uso de las medidas de Young no se restringe hoy día sólo al Cálculo de Variaciones, sino, como hemos apuntado en la introducción, también al estudio de ecuaciones diferenciales no lineales precisamente porque la propiedad anterior de convergencia es válida para toda función  $\varphi$  y no sólo para las funciones lineales o afines. Los pioneros en esta dirección han sido L. Tartar, R. DiPerna, F. Murat y otros.

**2.4 Un ejemplo unidimensional.** Describimos brevemente un modelo unidimensional que refleja el tipo de dificultades que surgen en los problemas de transiciones de fase y que sirve para mostrar lo que tienen de especial los principios variacionales que modelan estas situaciones.

Imaginemos una barra elástica unidimensional que ocupa el intervalo  $\Omega = (0,1)$  y que por razones energéticas prefiere ser deformada de acuerdo con dos estados posibles que vienen representados por dos números reales  $\alpha \in (0,1)$  y  $\beta > 1$ , es decir, dejada en libertad la barra elegiría elongaciones uniformes de razones  $\alpha$  ó  $\beta$ . En este caso podemos suponer que la función energía interna de la barra presentaría un término,  $\varphi$ , que podría escribirse en la forma

$$\varphi(x) = \left( \frac{1}{\beta - \alpha} |2x - \alpha - \beta| - 1 \right)^2.$$

El perfil de esta función está mostrado en la figura 2.1.

Postulemos que el funcional de energía interna es

$$I(u) = \int_0^1 \left( \varphi(u'(x)) + (u(x) - x)^2 \right) dx,$$

y consideremos el principio variacional que dará estados de reposo para la barra

$$(P) \quad \inf \{I(u) : u(0) = 0 \text{ y } u(1) = 1\}.$$

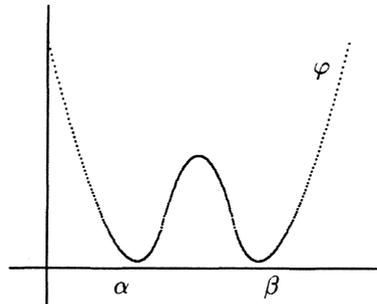


Figura 2.1

Una posible sucesión minimizante vendría dada por las funciones representadas en la figura 2.2, en donde las rectas conservan pendientes  $\beta$  y  $\alpha$  en segmentos de anchura relativa  $\lambda = (1 - \alpha) / (\beta - \alpha)$  y  $1 - \lambda$  respectivamente.

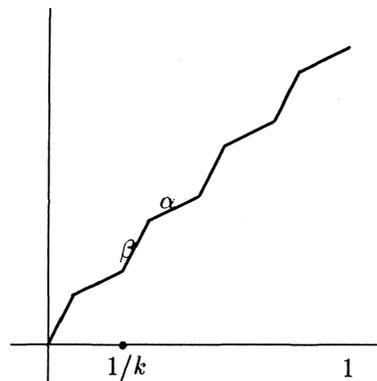


Figura 2.2

Se obtiene así que el ínfimo anterior es 0. El estado al cual converge la sucesión de estados minimizantes es  $u_0(x) = x$  que es un estado admisible del sistema. Sin embargo, es fácil comprobar que  $I(u_0) > 0$  de modo que no es un estado buscado por el sistema. De hecho este principio variacional no admite estados minimizadores. La microestructura es el salto cada vez más brusco entre los estados representados por  $\alpha$  y  $\beta$  en la sucesión minimizante, y la medida parametrizada asociada con dicha sucesión es

$$v = \lambda \delta_\beta + (1 - \lambda) \delta_\alpha,$$

que efectivamente contiene todos los datos acerca de la microestructura. La propiedad fundamental responsable de este comportamiento es la falta de convexidad de la función  $\varphi$ .

Una de las principales dificultades en modelos en dimensiones dos y tres, es que no siempre es posible juntar dos gradientes a través de una interfase plana y que la función que resulta sea ella misma un gradiente tal y como hemos hecho con  $\alpha$  y  $\beta$ . Esto es posible cuando dichos gradientes son compatibles cinéticamente, lo cual significa que la diferencia de ambos debe ser una matriz de rango uno. Físicamente, esto asegura que la función cuyo gradiente experimenta ese salto a través de la interfase plana es una función continua. Gran parte de las dificultades consiste en encontrar esas conexiones de rango uno entre las matrices que dan la mínima energía del sistema. Volveremos a estos tópicos más adelante.

### 3. SÓLIDOS CRISTALINOS Y TRANSICIONES DE FASE

Entenderemos un cristal sólido como un cuerpo hiperelástico. Para hacer explícita la importancia de las propiedades de simetría de un tal cristal, se describe su estructura interna mediante una red periódica 3-dimensional, dada por tres vectores independientes  $\{p_1, p_2, p_3\}$ , que forman la matriz  $P = (p_1, p_2, p_3)$ , con columnas  $p_i$ . Las posiciones atómicas vendrían representadas por

$$R = \{n_1 p_1 + n_2 p_2 + n_3 p_3 : n_i \in \mathbf{Z}\},$$

de manera que la densidad de energía  $W$ , que es función de las posiciones atómicas, ha de reflejar el hecho de que es posible cambiar de base de la red,  $\{\bar{p}_1, \bar{p}_2, \bar{p}_3\}$  y aún tener

$$\bar{R} = \{n_1 \bar{p}_1 + n_2 \bar{p}_2 + n_3 \bar{p}_3 : n_i \in \mathbf{Z}\} = R$$

No es difícil ver que dada una determinada base  $\{p_1, p_2, p_3\}$ , todas las bases equivalentes que dan la misma red son  $LP$ , para  $L \in GL(\mathbf{Z}^3)$ , esto es,  $L$  es una matriz no singular con elementos que son enteros, y en particular  $\det L = \pm 1$ . Así, junto con la indiferencia de observador, la densidad de energía  $W$  ha de exhibir la invarianza

$$(3.1) \quad W(F) = W(QFH), \quad \det F > 0, Q^T Q = \mathbf{1}, \det Q = 1, H \in \mathbf{H},$$

donde  $\mathbf{1}$  es la matriz identidad y  $\mathbf{H}$  es un subgrupo conjugado de  $GL(\mathbf{Z}^3)$ ,

$$\mathbf{H} = PGL(\mathbf{Z}^3)P^{-1}.$$

Además, normalizamos  $W$  con las propiedades

$$(3.2) \quad \begin{aligned} W(F) &\geq 0, \\ W(\mathbf{1}) &= 0 \\ \lim_{\det F \rightarrow 0} W(F) &= \infty, \end{aligned}$$

donde esta última condición expresa la idea de que una cantidad infinita de energía es necesaria para comprimir una parte del cuerpo a un plano, una recta o un punto.

La cuestión que nos interesa es, de acuerdo con la discusión de 2.1, encontrar deformaciones  $u(x)$  definidas en un dominio  $\Omega \subset \mathbf{R}^n$  ( $n = 2$  ó  $3$ ) con la propiedad

$$(3.3) \quad \int_{\Omega} W(\nabla u(x)) dx = \inf_{v=y_0 \text{ en } \partial\Omega} \int_{\Omega} W(\nabla v(x)) dx$$

e  $y_0$  es una deformación asignada previamente.

Las dificultades encontradas en el análisis del problema (3.3) son enormes, precisamente por la invarianza que presenta la energía interna o energía libre  $W$ , expresada en (3.1). Supongamos dada una matriz  $F$ ,  $\det F > 0$  y  $H = \mathbf{1} + a \otimes n \in \mathbf{H}$ . Por  $a \otimes n$  queremos significar la matriz de rango uno con elementos  $c_{ij} = a_i n_j$ . Entonces la función

$$f(\lambda) = W(F(\mathbf{1} + \lambda a \otimes n)), \quad -\infty < \lambda < \infty$$

es periódica de período 1, pues como  $H \in \mathbf{H}$  supone  $a \cdot n = 0$ , ( $\det H = 1 + a \cdot n$ )

$$\begin{aligned} f(1+\lambda) &= W(F(\mathbf{1} + \lambda a \otimes n + a \otimes n)) \\ &= W(F(\mathbf{1} + \lambda a \otimes n + a \otimes n + \lambda(a \otimes n)(a \otimes n))) \\ &= W(F(\mathbf{1} + \lambda a \otimes n)(\mathbf{1} + a \otimes n)) \\ &= W(F(\mathbf{1} + \lambda a \otimes n)H) \\ &= W(F(\mathbf{1} + \lambda a \otimes n)) \\ &= f(\lambda) \end{aligned}$$

(nótese que  $(a \otimes n)(a \otimes n) = a \cdot n a \otimes n = 0$ ), y por tanto, como los enteros son puntos de mínimo para  $f$  de acuerdo con (3.2), hay puntos donde  $f$  es cóncava, a menos que  $f$  sea constante. La derivada segunda respecto a  $\lambda$  se expresa

$$\frac{\partial^2 W}{\partial F_{ij} \partial F_{hk}} (F (1 + \lambda a \otimes n)) a^i a^h n^j n^k < 0$$

para determinado  $\lambda$ . Es decir, la condición de Legendre-Hadamard no es cierta. O dicho de otro modo  $W$  no es convexa de rango uno. De hecho, y según anunciamos, en condiciones normales no existen minimizadores para el problema (3.3). Pues aunque una sucesión minimizante  $\{u_j\}$  converja débilmente, el límite no resulta ser un minimizador.

Una construcción básica que aclara muy bien esta situación es la siguiente.

Sea  $F_0$  una matriz con  $\det F_0 > 0$ ,  $B = 1 + a \otimes n$  con  $\det B = 1 + a \cdot n > 0$  y  $\theta \in (0,1)$ .

Consideremos la deformación lineal

$$y(x) = Fx,$$

$$F = F_0 (1 + \theta a \otimes n) = (1 - \theta) F_0 + \theta F_0 B,$$

e imaginemos por simplicidad,  $|n|=1$ . Extendemos la función característica del intervalo  $(0, \theta)$  en  $(0,1)$ ,  $\chi(t)$ , periódicamente a todo  $\mathbf{R}$ , y pongamos

$$f^k(x) = \chi(kn \cdot x), \quad k = 1, 2, 3, \dots$$

Para cualquier dominio acotado  $\Omega \subset \mathbf{R}^3$  tenemos

$$f^k \xrightarrow{*} \theta \text{ en } L^\infty(\Omega),$$

hecho bien conocido. Ahora sea

$$u(\xi) = F_0 \left( \xi + \int_0^r \chi(t) dt a \right), \quad r = \xi \cdot n$$

y

$$u^k(x) = k^{-1} u(kx).$$

Es fácil comprobar que  $u^k \xrightarrow{*} \theta$  en  $H^{1,\infty}(\Omega)$ , esto es

$$u^k \rightarrow \theta \text{ uniformemente en } \Omega$$

y como

$$\nabla u^k = F^k = F_0 (1 + f^k a \otimes n) = (1 - f^k) F_0 + f^k F_0 B,$$

se tiene

$$\nabla u^k \overset{*}{\rightharpoonup} F \text{ en } L^\infty(\Omega)$$

Ahora bien, como  $f^k$  solo toma los valores 1 y 0,

$$W(F^k) = (1 - f^k) W(F_0) + f^k W(F_0 B)$$

y por consiguiente

$$W(F^k) \overset{*}{\rightharpoonup} (1 - \theta) W(F_0) + \theta W(F_0 B) \text{ en } L^\infty(\Omega).$$

Si ahora elegimos en particular  $F_0 = \mathbf{1}$  y  $B = \mathbf{1} + a \otimes n \in \mathbf{H}$ , entonces por (3.2) y (3.1),

$$W(F^k) = 0, \quad \forall k$$

es decir,  $\{u^k\}$  es una sucesión minimizante convergiendo débilmente. Sin embargo la energía del límite débil de los  $F^k$  es

$$W(F) = W(\mathbf{1} + \theta a \otimes n) > 0,$$

a menos que  $\mathbf{1} + \theta a \otimes n \in \mathbf{H}$ .

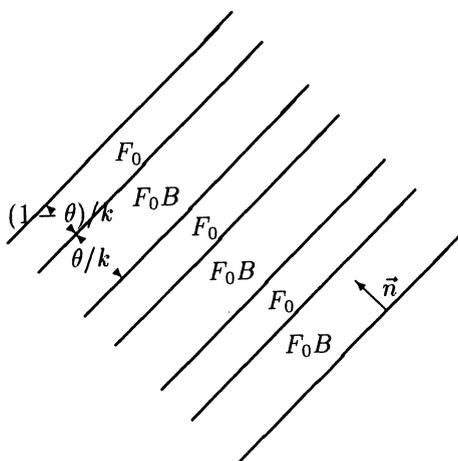


Figura 3.1

Este ejemplo sencillo muestra claramente cuales son las dificultades con las que nos enfrentamos. La sucesión minimizante exhibe oscilaciones cada vez más finas, pues se ve obligada a ello por la falta de semicontinuidad inferior del funcional  $W$ . Los gradientes toman los valores  $F_0$  y  $F_0 B$  en bandas paralelas de anchura relativa  $1-\theta$  y  $\theta$  respectivamente pero la escala real se reduce mediante un factor de  $1/k$  (figura 3.1). En el lenguaje físico se dice que el material cristalino busca el estado de mínima energía disponible desarrollando para ello una microestructura interna cinéticamente admisible cada vez más fina, aunque macroscópicamente el comportamiento del cristal puede entenderse a través del límite débil de una sucesión minimizante debido a la convergencia uniforme de  $u^k$  hacia  $y$ . Las predicciones a las que conducen todas estas ideas parecen estar en completo acuerdo con la realidad y de hecho, desde este punto de vista se recuperan las conclusiones clásicas deducidas a través de la teoría cristalográfica de materiales. Esta misma construcción es básicamente la que se usa para probar que quasiconvexidad implica convexidad de rango uno, una vez que se modifican adecuadamente los valores en la frontera de  $\Omega$ .

A menudo transformaciones de fase sólido-sólido conducen a ciertos estados en que se observan mezclas muy finas de las distintas fases, las cuales constituyen un modelo real de la situación que acabamos de describir analíticamente. Un ejemplo típico, y que puede servir de punto de partida para entender todas estas ideas son las transformaciones martensíticas, en que una interfase plana  $\pi$  separa una fase homogénea "austenita" de una mezcla muy fina de dos variantes gemelas de la otra fase "martensita" (figura 3.2).

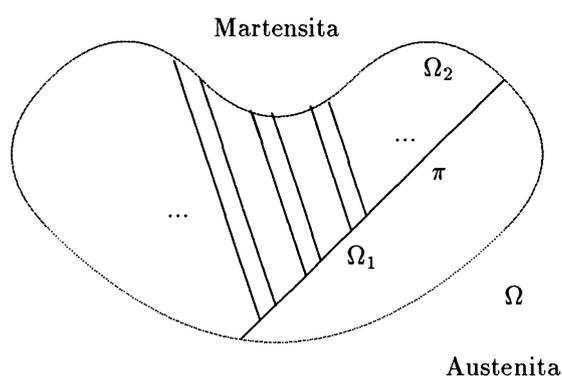


Figura 3.2

Para entender esta situación y lo que queremos decir por compatibilidad cinética, consideremos la fase homogénea austenita como configuración de referencia y aceptemos que por razones energéticas, un

cristal prefiere ser deformado de acuerdo con 3 gradientes constantes  $\mathbf{1}$ ,  $F^+$  y  $F^-$ , representando la fase austenita y las dos variantes gemelas de martensita, respectivamente (figuras 3.2 y 3.3). Entonces la compatibilidad cinética se traduce en que debe haber una deformación  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}^3$ ,  $u \in H^{1,\infty}(\Omega)$  con

$$\nabla u = F = \mathbf{1} \text{ en } \Omega_1$$

$$\nabla u = F = \begin{cases} F^+ \\ F^- \end{cases} \text{ en las láminas alternantes de } \Omega_2 .$$

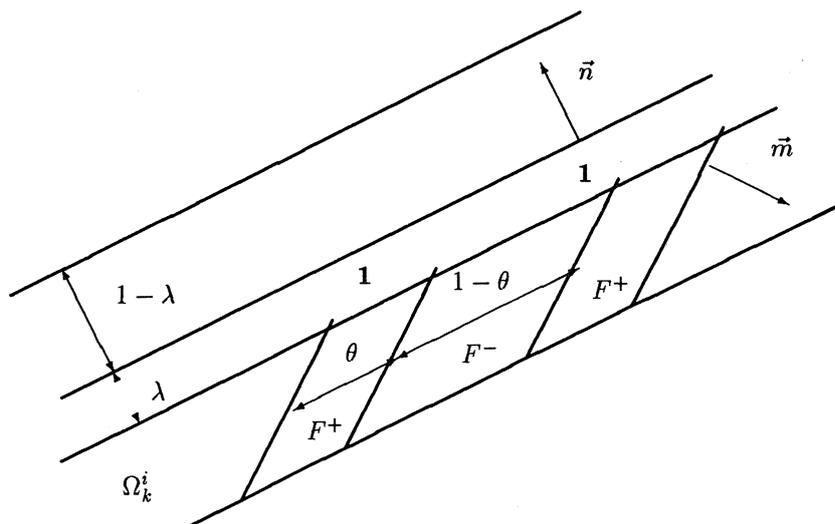


Figura 3.3

No es difícil ver que esta compatibilidad entre  $F^+$  y  $F^-$  significa

$$(3.4) \quad F^+ - F^- = a \otimes n$$

es decir,  $F^+ - F^-$  es una matriz de rango 1, donde  $n$  es el vector normal a las interfases entre  $F^+$  y  $F^-$ . Esta condición simplemente asegura la continuidad de  $u$  a través de la interfase. Sin embargo a lo largo de  $\pi$ ,  $u$  no puede estar definida como  $F^+$  o  $F^-$ , pues de hecho ni  $F^+ - \mathbf{1}$  ni  $F^- - \mathbf{1}$  son matrices de rango 1.

De este modo, cerca de la interfase  $\pi$ ,  $\nabla u$  ha de ser un gradiente de transición entre  $\Omega_1$  y  $\Omega_2$ . En realidad, la razón por la que el cristal desarrolla esta mezcla finísima de los gradientes  $F^+$  y  $F^-$  es para minimizar la energía que proviene de este gradiente de transición en  $\pi$ . O si se prefiere, para alcanzar compatibilidad cinética a través de esta interfase. Según sabemos ahora, el límite débil de esta distribución fina de gradientes es

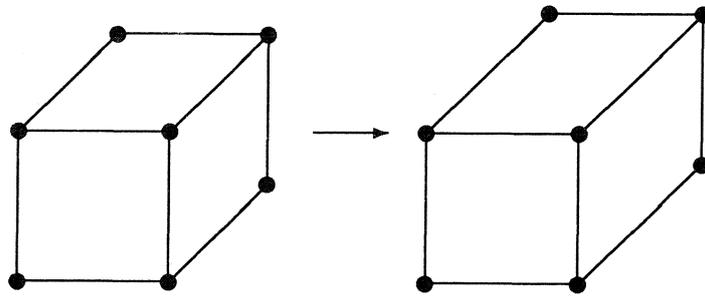


Figura 3.4

$$(3.5) \quad \lambda F^+ + (1-\lambda) F^-$$

y sorprendentemente resulta que

$$(3.6) \quad \lambda F^+ + (1-\lambda) F^- - \mathbf{1} = b \otimes m,$$

la condición de compatibilidad cinética a lo largo de una interfase plana entre el gradiente (3.5) y  $\mathbf{1}$ , donde  $m$  sería en este caso el vector normal a  $\pi$ . En otras palabras, la sucesión minimizante de la energía interna (suponiendo  $W(\mathbf{1}) = W(F^+) = W(F^-) = 0$ ) va buscando en  $\Omega_2$  el límite débil (3.5) pues así consigue la condición de compatibilidad cinética (3.6) a través de  $\pi$ .

Obviamente en situaciones reales el proceso no puede ser infinito, es decir, en  $\Omega_2$  no puede alcanzarse el límite débil (3.5). Cuando la distribución de láminas en  $\Omega_2$  es suficientemente fina, energías intersuperficiales entran en juego y adquieren un papel dominante respecto a la energía interna, lo que hace que el proceso pare.

Este ejemplo es un caso particular de la situación general que pasamos ahora a describir brevemente. La energía interna,  $W$ , normalmente depende también de la temperatura  $\theta$ , y precisamente las transformaciones de fase suelen tener lugar a una determinada temperatura  $\theta_0$ , llamada

temperatura de transformación o transición, y que depende del material en cuestión. Esta transformación consiste en un cambio de estructura cristalina (por ejemplo de cúbica centrada en las caras a tetragonal) y viene representado por una matriz  $U_0$  que refleja este cambio. En el mencionado caso cúbica-tetragonal y considerando la red cúbica como referencia,

$$U_0 = v_1 \mathbf{1} + (v_2 - v_1) e \otimes e$$

donde  $|e| = 1$  y  $v_1 \neq v_2$ , son constantes positivas. Así para temperaturas mayores que  $\theta_0$  pero cercanas, determinada estructura, que consideramos como referencia, es estable. Mientras que para temperaturas más pequeñas que  $\theta_0$ , hay un cambio de estabilidad y la estructura representada por la matriz  $U_0$ , respecto de la configuración de referencia, es ahora estable. Por estabilidad queremos decir

$$W(\mathbf{1}, \theta) \leq W(F, \theta), \quad \theta \geq \theta_0,$$

$$W(U_0, \theta) \leq W(F, \theta), \quad \theta \leq \theta_0.$$

Ahora bien, de acuerdo con la invarianza (3.1), si una rotación  $R \in \mathbf{H}$ , de modo que la forma de la celda base de la red cristalina no cambia, entonces

$$W(QU_0R) = W(U_0), \quad \forall Q \in SO(3),$$

y en particular si  $U_0$  es un mínimo para  $W$ , también lo es  $QU_0R$ . El conjunto de tales  $R$  para una estructura cristalina determinada constituye un grupo de  $SO(3)$  llamado el grupo puntual de la red, que es siempre un grupo discreto. Para cada tal  $R$  diremos que  $\{QU_0R : Q \in SO(3)\}$  es un pozo de potencial para  $W$ , y como podemos también escribirlo  $\{QR^T U_0 R : Q \in SO(3)\}$ , asociaremos tal pozo a la matriz  $R^T U_0 R$ ,  $R \in \mathbf{P}^v$ , el grupo puntual de la red. Por ejemplo, para una red cúbica centrada en las caras,  $\mathbf{P}^v$ , es el grupo de las 24 rotaciones que dejan invariante el cubo, y de las 24 matrices  $R^T U_0 R$ ,  $R \in \mathbf{P}^{24}$ , con  $U_0$  dada anteriormente, solamente hay 3 distintas que corresponden a las 3 variantes de martensita.

Resumiendo, en la temperatura de transición tenemos un determinado número de pozos de potencial para  $W$  asociados a las matrices  $\mathbf{1}$ ,  $R^T U_0 R$ ,  $R \in \mathbf{P}^v$ , esto es

$$W(F, \theta_0) > W(U, \theta_0),$$

para cualquier gradiente de deformación  $F$  que no esté en uno de estos pozos. Ahora se entiende que resolver el problema

$$\min_A \int_{\Omega} W(\nabla u, \theta_0) dx$$

con

$$A = AF_0 = \{u \in H^{1,\infty}(\Omega) : u = F_0 x, x \in \partial \Omega\}$$

donde  $F_0$  es una matriz constante, supone buscar gradientes  $F(x) = \nabla u(x)$  de manera que  $F(x)$  está en un pozo de potencial para cada  $x \in \Omega$ . No obstante, la compatibilidad cinética obliga a los gradientes a exhibir oscilaciones cada vez más finas, según hemos visto.

#### 4. MOTIVACIÓN E IMPORTANCIA

En la literatura de los últimos años, se ha hablado de *laminados* para describir heurísticamente la situación referente a transformaciones martensíticas que hemos discutido brevemente en la sección anterior. Por sí misma, esta palabra proporciona una idea intuitiva del comportamiento que cabría esperar en este tipo de transiciones de fase. También se habla de *microestructura*, refiriéndose a la estructura fina interna que exhiben tales materiales en su intento por alcanzar la mínima energía que les es permitida. De esta manera, laminado es un término descriptivo para las microestructuras. Lo que se pretende aquí es ofrecer un marco general para trabajar con microestructuras en toda su posible complejidad según surge en la descripción analítica de transiciones de fase en sólidos cristalinos. Muchos son los artículos que tratan estos temas y sientan las bases para usar el Cálculo de Variaciones en este contexto. En la Bibliografía hemos incluido los más significativos desde nuestro punto de vista, aunque las referencias generales son mucho más amplias. En la sección anterior hemos motivado, en la profundidad que ha sido posible, cómo surgen estos modelos variacionales.

Nuestro punto de partida es el concepto de condiciones  $(H_n)$ , originalmente introducidas por B. Dacorogna en 1985 ([13]), y sobre él completamos el conjunto de las medidas de probabilidad asociadas tomando límites débiles de tales objetos. La familia resultante de medidas de probabilidad es lo que denominamos la familia de laminados y su estructura subyacente se nos revela a través de la interpretación gráfica que damos de las condiciones  $(H_n)$  en términos de diagramas en forma de árbol. Estos resultan ser muy convenientes para nuestros propósitos. Una importante propiedad es que los laminados pueden actualizarse como gradientes de deformación o estados límites de tales deformaciones. De hecho, los laminados constituyen una clase especial de medidas de Young tal como han sido introducidas en la sección 2.3, y todos los ejemplos explícitos que se conocen o encontrados experimentalmente, responden a la propia estructura de los laminados o no se sabe decidir si lo son o no. Esta dificultad está íntimamente ligada al problema apuntado con anterioridad sobre si quasiconvexidad y convexidad de rango uno son el mismo concepto o no según insistiremos próximamente. Algunos de los hechos que pueden obtenerse con laminados se deben a su propia estructura interna, algo de lo que a primera vista carecen los gradientes

en general. Sería un hecho realmente asombroso que los gradientes compartieran esta misma estructura. Esto sería cierto si se pudiera probar que esas dos nociones de convexidad son equivalentes.

La motivación para estudiar en profundidad esta familia de medidas de probabilidad que hemos llamado laminados es múltiple. En primer lugar, su trascendencia a la hora de describir las microestructuras mecánicas que aparecen en procesos de transiciones de fases en sólidos cristalinos. Creemos haber insistido lo suficiente en este punto. Pero teóricamente hay otros motivos que hacen de nuestro afán algo que vale la pena. Un ejemplo conocido desde los primeros años de la década de los 80 cuando J. Ball, R. Khon y L. Tartar trataban el problema de funciones separadamente convexas. Fue redescubierto posteriormente por V. Nesi y G. Milton como un ejemplo no trivial de una microestructura con infinitos niveles de complejidad en la que, no obstante, sólo un número finito (a decir verdad 4, según veremos) de matrices participaba. Se explicará este ejemplo y lo que significa la expresión *infinitos niveles de complejidad* a la luz de la noción general de laminado. Además, resulta que este concepto general de microestructura puede caracterizarse a través de la desigualdad de Jensen para funciones convexas de rango uno. Este es el lazo que une los laminados con las funciones convexas de rango uno. La importancia de este hecho se pone de manifiesto al comparar con la caracterización análoga para medidas de Young generales mediante funciones quasiconvexas, obtenida por D. Kinderlehrer y P. Pedregal [31], de manera que los laminados son a la convexidad de rango uno, lo que las medidas de Young gradientes a la quasiconvexidad. De este modo la distinción entre laminados y medidas de Young gradientes es tan sutil como lo es distinguir quasiconvexidad y convexidad de rango uno. Finalmente, estudiando el caso del problema de los dos pozos de potencial, que supone un paso hacia modelos más reales, D. Kinderlehrer y P. Pedregal ([32]) encontraron microestructuras continuamente distribuidas. Su descripción requiere un proceso infinito o, usando la misma expresión anterior, infinitos niveles de complejidad. Se intentaba el ambicioso proyecto de poder clasificar todas las posibles microestructuras que, por lo menos formalmente, podría alcanzar el cristal como estado de reposo. El descubrimiento de estas microestructuras continuamente distribuidas sugirió que este problema podría ser mucho más complejo y difícil de tratar de lo que se pensó en un principio. Desde luego pedía y exigía una aclaración rigurosa sobre lo que se debe entender por microestructura. Físicamente, estas microestructuras altamente complejas no han sido observadas. Ni tampoco obtenidas numéricamente. Desde cualquiera de estos dos puntos de vista, es difícil acercarse a "finura" infinita por razones obvias, de manera que un número infinito de matrices pudiera aparecer en la microestructura. No más de 4 matrices participan en las microestructuras observadas experimentalmente o numéricamente, aunque se ha sugerido recientemente que algunos cálculos de C. Collins y M. Luskin ([9-11]) parecen tender a una microestructura con soporte en 7 matrices.

## 5. RESUMEN Y OBJETIVOS

El objetivo principal de esta memoria es mostrar cómo puede formalizarse el concepto de laminado, tomado como sinónimo de microestructura. De modo que no sea una idea vaga más o menos ajustada a la realidad que pretende modelizar, sino una noción con un sentido preciso cuya estructura permite entender, tratar e incluso prever, al menos teóricamente, el comportamiento interno de determinados sistemas físicos. Esto se lleva a cabo en la sección 6.1, donde se descubre la estructura de los laminados a través de las condiciones de compatibilidad cinética o mecánica, que se traduce en las conexiones de rango uno escondidas entre las matrices que participan en la microestructura. Varios ejemplos, incluyendo aquéllos que motivaron este trabajo, se tratan en la sección 6.2.

El trabajo [31] también motivó el descubrir la relación entre estos laminados y la noción de convexidad de rango uno, según hemos discutido previamente. En la sección 6.3, mostramos que esta relación es tan estrecha como lo es la conexión entre quasiconvexidad y medidas de Young gradientes. El resultado principal es la caracterización de los laminados a través de la clásica desigualdad de Jensen (que es siempre válida para medidas de probabilidad y funciones convexas en el sentido usual) para funciones convexas de rango uno.

Finalmente en la sección 6.4 tratamos el caso de las tres matrices. Para esto nos es imprescindible introducir las envolturas convexa de rango uno, quasiconvexa e incluso policonvexa de conjuntos, en analogía con las envolturas convexas habituales. A través del estudio de la estructura de la envoltura convexa de rango uno conseguimos probar que en el caso en el que los estados no son compatibles por pares, es decir, cada diferencia de dos de las tres matrices no es una matriz de rango uno, entonces no puede existir una microestructura en la que sólo participaran las tres matrices. Este resultado va un poco más lejos que las conclusiones parciales obtenidas hasta el momento por R. Khon ([34], [35] y N. Firoozye ([23], [24]) quienes usan algunas técnicas algebraicas que alcanzaron un éxito completo con el caso de dos matrices, determinando incluso la quasiconvexificación de una función cuadrática, pero que hasta ahora no han servido para tratar satisfactoriamente el caso de tres.

## 6. DESARROLLO

**6.1. Condiciones  $(H_n)$  y laminados.** No es sorprendente cómo se puede generalizar la situación descrita en la sección 3 con dos y tres matrices a un número finito de matrices. Todo lo que hace falta para llevar a cabo la construcción de la correspondiente sucesión de gradientes son las condiciones de compatibilidad expresadas en esas conexiones de rango uno. Aquí tomamos prestado el concepto de condiciones  $(H_n)$  de Dacorogna en [13] ó [14], pues esto es exactamente lo que necesitamos.

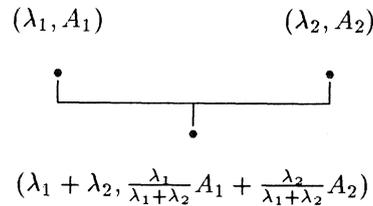


Figura 6.1

**DEFINICIÓN.**

El conjunto de pares  $\{(\lambda_i, A_i)\}_{1 \leq i \leq n}$ ,  $\sum \lambda_i = 1$ ,  $\lambda_i > 0$  y  $A_i$  son matrices, verifica la condición  $(H_n)$  si:

i) Para  $n = 2$ :  $\text{rango}(A_1 - A_2) \leq 1$ .

ii) Para  $n > 2$  y posiblemente después de una permutación de índices,

$$\text{rango}(A_1 - A_2) \leq 1$$

y si ponemos

$$\mu_1 = \lambda_1 + \lambda_2,$$

$$B_1 = \frac{\lambda_1}{\mu_1} A_1 + \frac{\lambda_2}{\mu_1} A_2,$$

$$\mu_i = \lambda_{i+1}, \quad B_i = A_{i+1}, \quad 2 \leq i \leq n-1,$$

el conjunto de pares  $\{(\mu_i, B_i)\}_{1 \leq i \leq n-1}$  satisface  $(H_{n-1})$ .

En vez de discutir esta definición analíticamente, es mucho mejor dar una interpretación gráfica que es muy conveniente y clara. Acordemos representar los pares  $(\lambda_i, A_i)$  mediante puntos negros y la transformación en ii) de la definición según se muestra en la figura 6.1. Entonces cualquier condición  $(H_n)$  puede representarse en modo de árbol como el de la figura 6.2.

Una observación importante es que puntos diferentes no corresponden necesariamente a pares distintos. En estos diagramas vemos como las condiciones de compatibilidad se ajustan hasta llegar a la deformación subyacente  $F = \sum \lambda_i A_i$ . Estas condiciones de compatibilidad o conexiones de rango uno nos permiten construir la correspondiente sucesión de gradientes con las propiedades necesarias.

Otra observación es que dado el conjunto inicial de pares  $\{(\lambda_i, A_i)\}_{1 \leq i \leq n}$  el diagrama asociado podría no ser único.

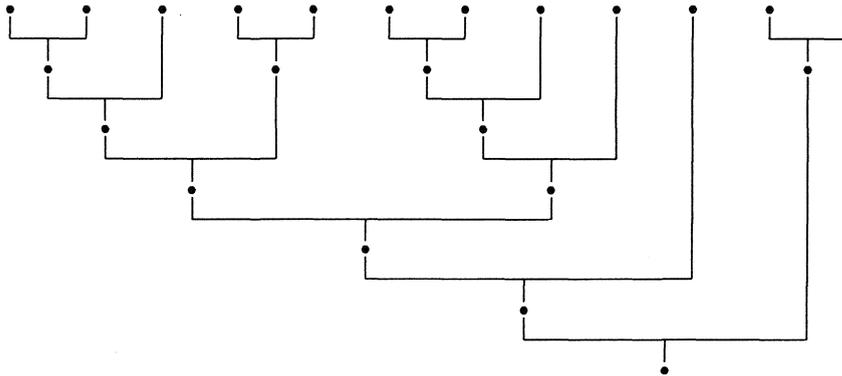


Figura 6.2

Ahora estamos preparados para la siguiente definición.

**DEFINICIÓN.**

Dado un conjunto compacto de matrices  $K$ , y  $F \in co(K)$ , llamamos un laminado con soporte en  $K$  y deformación subyacente  $F$ , a una medida de probabilidad  $\nu$  en  $K$  con baricentro  $F$  y tal que existe una sucesión de conjuntos de pares  $\{(\lambda_i^k, A_i^k)\}_{1 \leq i \leq n_k}$  verificando la condición  $(H_{nk})$  y

i) para toda función continua  $\varphi : M \rightarrow R$

$$\langle \nu, \varphi \rangle = \lim_{k \rightarrow \infty} \sum_i \lambda_i^k \varphi(A_i^k);$$

ii) para cada  $k$ ,

$$F = \sum_i \lambda_i^k A_i^k.$$

No es difícil deducir de i):

iii)  $|A_i^k| \leq M$  uniformemente en  $i, k$ ;

iv)  $\forall U$ , entorno abierto de  $K$ ,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \sum_{A_i^k \notin U} \lambda_i^k = 0$$

De manera que un laminado es un límite débil \* en  $M(K)$  (el conjunto de medidas con soporte en  $K$ ) de medidas de probabilidad asociadas a condiciones  $(H_n)$ . Así debe quedar claro (fijándonos en la cota uniforme iii)) que cualquier laminado,  $\mu$ , es una medida de Young gradiente, es

decir, podemos encontrar una sucesión de deformaciones  $\{u^k\}$  con las siguientes propiedades:

$$1) u^k(x) = y(x), \quad x \in \partial\Omega, \text{ donde } y(x) = Fx \quad \text{y} \quad F = \int_K A dv(A);$$

$$2) u^k \xrightarrow{*} y \text{ en } H^{1,\infty}(\Omega);$$

$$3) \lim_{k \rightarrow \infty} \int_E \varphi(\nabla u^k) dx = \int_E \int_K \varphi(A) dv(A) dx = |E| \int_K \varphi(A) dv(A)$$

para cualquier conjunto medible  $E$  y función continua  $\varphi$ .

El modo de encontrar esta sucesión es a través de la técnica de poner bandas dentro de bandas tantas veces como sea preciso, según hemos discutido para el caso con tres matrices en el contexto de transformaciones martensíticas.

**6.2. Ejemplos.** Consideremos varios ejemplos. El caso más simple es  $K = \{A, B\}$ . En este caso conocemos todos los laminados: si  $\text{rango}(A-B) > 1$  entonces los únicos laminados son  $\delta_A$  y  $\delta_B$ , pero si  $\text{rango}(A-B) = 1$  entonces cualquier combinación convexa de esas dos deltas es un laminado. Este último enunciado es claro, pues entonces la estructura en árbol es simplemente

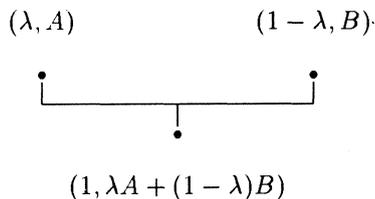


Figura 6.3

Pero la primera afirmación no es tan directa. Podría haber algún modo especial de ordenar las condiciones  $(H_{n_k})$  de manera que obtuviéramos que  $v = \lambda \delta_A + (1 - \lambda) \delta_B$  es un laminado. Que esto no es así, es consecuencia de usar la continuidad débil \* de los menores  $2 \times 2$ ; esto es, si  $M$  representa un tal menor, entonces debe ser cierto que

$$\int_K M(P) dv(P) = M\left(\int_K P dv(P)\right)$$

o

$$\lambda M(A) + (1 - \lambda) M(B) = M(\lambda A + (1 - \lambda) B),$$

y esta igualdad obliga a que rango  $(A-B) \leq 1$ .

Discutiremos el caso de tres matrices al final, aunque puede imaginarse en este momento los ejemplos fáciles cuando hay conexiones de rango uno uniendo las matrices. Con cuatro matrices, queremos examinar primero los ejemplos directos. La figura 6.4 los muestra en términos de diagramas y la figura 6.5, geoméricamente (las líneas dibujadas indican rayos de rango uno).

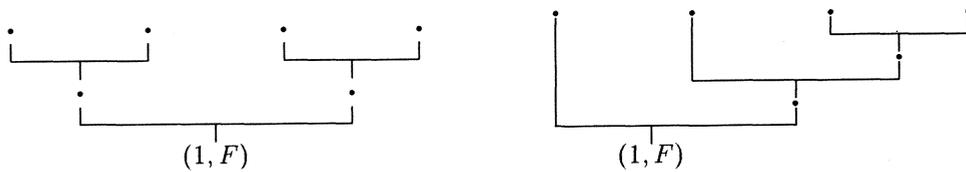


Figura 6.4

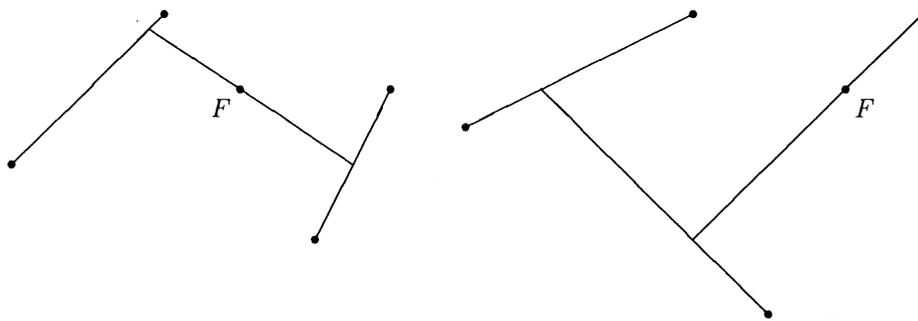


Figura 6.5

Pero hay una situación distinta que no puede lograrse en un número finito de pasos. Nos referimos al ejemplo interesante mencionado en la sección 4. Geométricamente, es el que se ha dibujado en la figura 6.6. Para la  $F$  del dibujo uno tendría la sucesión de condiciones  $(H_n)$  de la figura 6.7. Así pues, debe resultar claro que  $F$  puede obtenerse como deformación subyacente de un laminado. Y decimos que este laminado presenta infinitos

niveles de complejidad pues no podemos obtenerlo mediante un proceso finito de condiciones  $(H_n)$ .

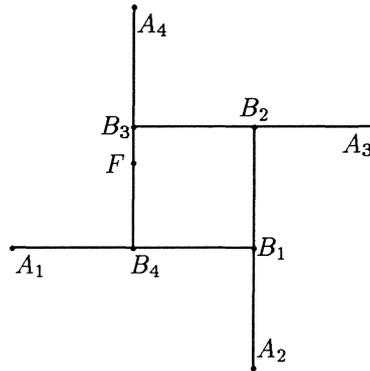


Figura 6.6

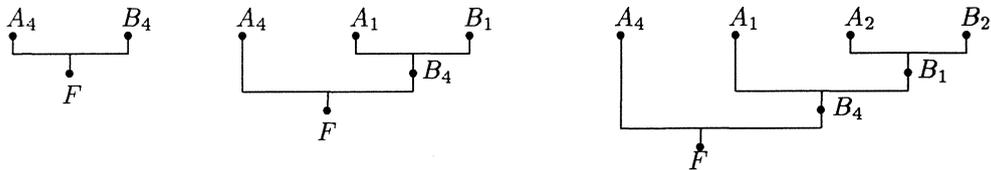


Figura 6.7

Esta configuración particular es la que estaban tratando Ball, Kohn y Tartar desde el punto de vista de funciones separadamente convexas de dos variables. Concretamente, se dieron cuenta de que si  $\varphi$  es separadamente convexa entonces podemos decir algo sobre  $\varphi(F)$  en términos de  $\varphi(A_i)$ . En el lenguaje de los laminados esto no es sino la desigualdad de Jensen

$$\varphi\left(\int_K A \, dv\right) = \varphi(F) \leq \int_K \varphi(A) \, dv$$

para  $K = \{A_1, A_2, A_3, A_4\}$  y  $v$  el laminado que acabamos de describir. Volveremos a estas cuestiones en la próxima sección. Una vez que se

entiende este ejemplo, otras configuraciones similares pueden imaginarse con cuatro matrices generando una variedad lineal de tres dimensiones o incluso ejemplos con más de cuatro matrices. En este sentido, mostraremos al final que este tipo de ejemplos requiere al menos cuatro matrices y no hay nada parecido con únicamente tres matrices.

Para las aplicaciones a problemas más reales desde el punto de vista físico, el conjunto compacto de matrices  $K$  es el conjunto de ceros de la función energía interna o energía libre o conjunto de pozos de potencial. Volveremos a estas cuestiones en la próxima sección. Este conjunto  $K$  debe incorporar las propiedades de invarianza relativas a la simetría del material. Entonces es elemental comprobar que un laminado minimizador (un laminado asociado a una sucesión minimizante) con energía cero es un laminado cuyo soporte está contenido en  $K$ , y de este modo las microestructuras admisibles son exactamente el conjunto de laminados con soporte en  $K$ . En general, encontrar todas estas microestructuras o clasificarlas es un problema bastante difícil de tratar. Casos especiales pueden encontrarse a lo largo de las referencias, fruto del trabajo de mucha gente. De particular interés, D. Kinderlehrer y P. Pedregal ([31-33]) han estudiado propiedades generales de conjuntos de microestructuras y, según se anunció, incluso encontraron laminados continuamente distribuidos cuando  $K$  es el conjunto de dos pozos de potencial (ver también [36], [37]).

**6.3. Caracterización mediante funciones convexas de rango uno.** No hay duda que la convexidad de rango uno podría tener una relación íntima con los laminados, pues un ingrediente esencial de un laminado son las conexiones de rango uno entendidas como compatibilidad mecánica o cinética. Supongamos que tenemos una función convexa de rango uno  $\varphi$  que es continua, y una familia de pares  $\{(\lambda_i, A_i)\}_{1 \leq i \leq n}$  que satisface la condición  $(H_n)$ . Entonces, es bastante fácil teniendo en cuenta el modo recursivo en el que están definidas las condiciones  $(H_n)$  que

$$\varphi\left(\sum_i \lambda_i A_i\right) = \varphi(F) \leq \sum_i \lambda_i \varphi(A_i),$$

que no es otra cosa que la desigualdad de Jensen para el laminado  $\sum \lambda_i \delta_{A_i}$ , según hemos observado. Si ahora  $\nu$  es un laminado de acuerdo con nuestra definición general entonces por la continuidad de  $\varphi$ ,

$$\varphi\left(\int_K A \, d\nu\right) \leq \int_K \varphi(A) \, d\nu$$

que de nuevo es la desigualdad de Jensen. De manera que este tipo de desigualdad es una condición necesaria para cualquier función convexa de rango uno, continua y cualquier laminado. Lo que es importante es que esta desigualdad es exactamente una caracterización de los laminados de acuerdo con nuestra definición. Más precisamente

TEOREMA. Una medida de probabilidad  $\nu$  con soporte en  $K$  y baricentro

$$F = \int_K A \, d\nu(A) \in \text{co}(K)$$

es un laminado si y sólo si para toda función continua y convexa de rango uno se verifica la desigualdad de Jensen

$$\varphi(F) \leq \int_K \varphi(A) \, d\nu(A).$$

Si comparamos este resultado con el correspondiente teorema de [31] nos encontramos con lo que señalamos con anterioridad: el teorema permanece válido palabra por palabra cambiando laminado por medida de Young gradiente y convexidad de rango uno por quasiconvexidad. Así, si pudiéramos encontrar una medida de Young,  $\nu$  con soporte compacto que no fuera un laminado entonces, por estas caracterizaciones a través de la desigualdad de Jensen, debería haber al menos una función continua y convexa de rango uno,  $\varphi_0$  para la que

$$\varphi_0(F) > \int_K \varphi_0(A) \, d\nu(A).$$

Pero como  $\nu$  es una medida de Young gradiente,  $\varphi_0$  no puede ser quasiconvexa. Al revés, si los laminados y las medidas de Young gradientes son la misma cosa (independientemente del soporte compacto  $K$ ) entonces convexidad de rango uno y quasiconvexidad serían conceptos equivalentes. Esto no es tan claro a partir de estas desigualdades de Jensen. Pero para cualquier función  $u$  en  $H^{1,\infty}(\Omega)$ , con valores de frontera afines dados por

$F$ , podemos hablar de la medida de Young homogenizada  $\nu = \overline{\delta \nabla u}$  (según se define en [31] obtenida por un proceso típico de homogenización, la cual es ella misma una medida de Young gradiente homogénea (independiente de  $x$ ), y por lo tanto un laminado si suponemos que son los mismos. Este laminado particular tiene soporte compacto y deformación subyacente, usando el teorema de la divergencia,

$$\int_M A \, d\nu(A) = \int_\Omega \nabla u \, dx = F.$$

De aquí si  $\varphi$  es convexa de rango uno

$$\varphi(F) \leq \int_M \varphi(A) \, d\nu(A) = \int_\Omega \varphi(\nabla u) \, dx$$

y  $\varphi$  es, por definición, quasiconvexa.

La prueba del teorema no es difícil una vez que se sitúa en el contexto apropiado del análisis funcional. Sólo damos en la presente memoria los

distintos elementos que componen la prueba, y referimos al lector a [40] donde pueden encontrarse las demostraciones completas. Por un lado, disponemos de la representación de la convexificación de rango uno obtenida por B. Dacorogna en [13] (la cual le condujo a introducir la idea de condición  $(H_n)$ ): si  $\varphi$  es continua entonces su convexificación de rango uno,  $R\varphi$ , viene dada por

$$R\varphi(F) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_i \varphi(A_i) : \{(\lambda_i, A_i)\}_{1 \leq i \leq n} \text{ verifica la condición } (H_n) \text{ y} \right.$$

$$F = \sum \lambda_i A_i \left. \right\}$$

Un dato principal en esta expresión es conseguir el control uniforme en las  $A_i$  en el ínfimo. Esto puede conseguirse usando el siguiente hecho que es prácticamente una observación.

**PROPOSICIÓN.** *Sea  $\varphi: M \rightarrow R$  una función continua tal que  $\varphi^{**} = \varphi$  fuera de un conjunto convexo y cerrado  $B$ . Entonces si  $F \in B$ ,*

$$R\varphi(F) = \inf \left\{ \sum_{i=1}^n \lambda_i \varphi(A_i) : \{(\lambda_i, A_i)\}_{1 \leq i \leq n} \text{ verifica la condición } (H_n) \text{ y} \right.$$

$$F = \sum \lambda_i A_i, A_i \in B, \in B, \forall i \left. \right\}.$$

$\varphi^{**}$  denota la convexificación usual de  $\varphi$ , pero la condición  $\varphi^{**} = \varphi$  puede reemplazarse por  $R\varphi = \varphi$ .

Todos estos hechos junto con el teorema de Hahn-Banach proporciona el resultado. aunque hay que proceder en dos pasos, considerando en primer lugar una clase especial de funciones convexas de rango uno que toman el valor  $+\infty$  fuera de algún conjunto compacto. La idea de la prueba es la misma que para quasiconvexidad y medidas de Young gradientes aunque carecemos de un hecho como el de la proposición anterior para quasiconvexidad y alguna otra técnica hace falta para superar esta dificultad. No queremos decir, sin embargo, que la proposición no sea cierta para quasiconvexidad. Simplemente no se sabe.

**6.4. El caso de las tres matrices.** El hecho principal del que pretendemos hablar en esta sección es el caso en el que el conjunto compacto de matrices admisibles en una microestructura es  $K = \{A_1, A_2, A_3\}$  donde las  $A_i$  no son compatibles por pares, y mostrar que entonces no puede haber un laminado con soporte en  $K$  excepto  $\delta_{A_i}$ . O dicho de otro modo si  $f$  es una función continua con alguna condición apropiada en el infinito (por ejemplo, si  $f^{**} = f$  fuera de un conjunto

compacto) y  $f^{-1}(0) = K$ , entonces también tenemos que  $Rf^{-1}$  es de nuevo  $K$ , o  $Rf$  es estrictamente positiva en  $\text{co}(K) - K$ . Nos estamos planteando si tres fases homogéneas estables de un cristal que no son compatibles mecánicamente por partes pueden formar una microestructura, y si es así en qué condiciones. Intuitivamente hablando se podría concluir sin reparos que esto es imposible, supuesto no hay compatibilidad cinética entre cualesquiera dos de las fases. Sin embargo después de estudiar con cierto detenimiento el caso de las cuatro matrices con infinitos niveles de complejidad, se ve la necesidad de ser un poco más prudente. A pesar de esto la respuesta es no, como cabría esperar, si tomamos laminado y microestructura como términos equivalentes.

El caso  $A_i - A_j =$  matriz de rango uno puede tratarse sin demasiada dificultad. Los diagramas serían

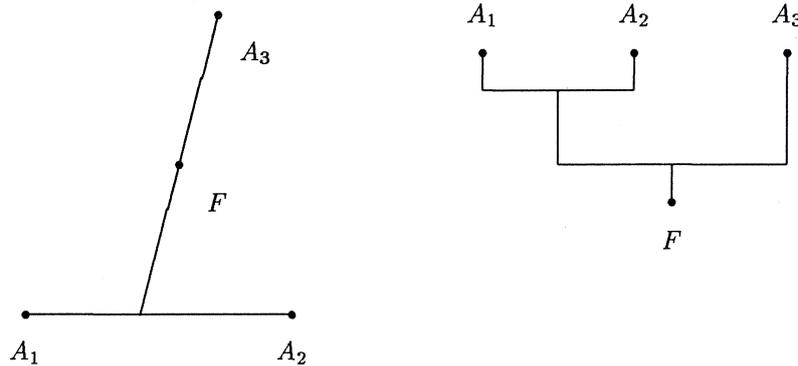


Figura 6.8

donde  $A_1 - A_2$  es convexa de rango uno y  $A_3 - \lambda A_1 - (1 - \lambda) A_2$  es también de rango uno para algún  $\lambda \in (0, 1)$ .

Previamente necesitamos introducir la idea de quasiconvexificación, convexificación de rango uno e incluso policonvexificación de conjuntos. Lo que queremos decir con cada una de estas convexificaciones es lo siguiente. Dado un conjunto de matrices  $K$ ,  $RK$  (o  $QK$  o  $PK$ ) representa el conjunto de matrices  $F$ , tales que existe un laminado (o medida de Young gradiente o medida policonvexa, respectivamente) con soporte en  $K$  y deformación subyacente  $F$ . Una medida policonvexa en este contexto es una medida de probabilidad  $\nu$  para la que

$$\varphi(F) \leq \int_K \varphi(A) d\nu(A)$$

para toda función policonvexa y continua. O equivalentemente

$$M(F) = \int_K M(A) dv(A)$$

para todo menor  $M$ .

No es difícil comprobar,

$$RK \subset QK \subset PK \subset \text{co}(K).$$

No es un asunto fácil el encontrar  $RK$  o  $QK$  incluso en casos fáciles. Cuando  $K$  es un conjunto de tres matrices  $\{A_1, A_2, A_3\}$  que no son compatibles por parejas (es decir, las diferencias de cada dos no son matrices de rango uno), el modo de probar que no existen laminados no triviales es mostrando que  $RK = K$ . Aunque en realidad, es también cierto que en algunos ejemplos particulares  $RK$  está estrictamente contenido en  $PK$  y no sabemos determinar en estos casos  $QK$ . La estructura especial de  $RK$  nos permite concluir que  $RK = K$  para este  $K$  particular.

Para situaciones más generales hay diversos resultados en la estructura de  $RK$ . Véase [40]. Por simplicidad, vamos a conservarnos en un nivel más sencillo que es suficiente para tratar el caso de tres matrices que nos ocupa en esta sección. El hecho crucial es:

**TEOREMA.** Si  $K = \{A_1, A_2, A_3\}$  y  $A_1$  no es compatible con ninguna matriz en la envoltura convexa  $\text{co}\{K\}$  entonces

$$RK \subset \text{co}\{\{A_2, A_3\}\} \cup \{A_1\}.$$

La idea de la prueba es que para tener laminados no triviales en los que participe  $A_1$  necesitamos conexiones de rango uno con la envoltura convexa de  $K$  si no con  $K$  mismo (como en el ejemplo de las cuatro matrices en la sección 6.2). Un paso intermedio de la prueba nos obliga a encontrar  $PK$ . Esto es elemental para este  $K$  (restringiendo atención a dimensión 2) pues el único requisito es la linealidad de la función determinante. El peor caso posible, mostrado en la figura 6.9, es  $PK = \gamma \cup \{A_1\}$  donde  $\gamma$  es una curva continua a través de  $\text{co}\{K\}$  uniendo  $A_2$  y  $A_3$ , y tal que  $\gamma \cap [A_2, A_3] = \{A_2, A_3\}$ . En otros ejemplos, de acuerdo con cuantas líneas de rango uno hay en el plano generado por las tres matrices, se obtiene directamente  $PK = K$ .

Cuando  $A_i - A_j$  no es una matriz de rango uno para ninguna combinación de índices es elemental el comprobar que al menos unas de las  $A_i$  (por ejemplo,  $A_3$ ) no puede conectarse a nada en  $\text{co}(K)$  mediante rectas de rango uno, de modo que por el teorema  $RK \subset \text{co}(\{A_2, A_3\}) \cup \{A_1\}$ . Y como  $A_2$ , a su vez, no está conectada a  $A_3$ , entonces  $RK = K$ . En consecuencia, los únicos laminados son las deltas  $\delta_{A_i}$ , como se pretendía probar.

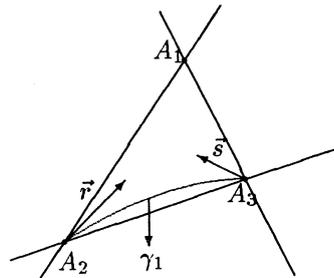


Figura 6.9

En este momento no se sabe si podría haber medidas de Young gradientes, que no fueran laminados, con soporte en tres matrices no compatibles por pares (si quasiconvexidad y convexidad de rango uno son el mismo concepto, entonces esto sería imposible de entrada), pero si existiera un tal objeto la sucesión de gradientes generadora tendría que ser tan caótica que seríamos prácticamente incapaces de descubrir ninguna microestructura u ordenamiento en ella. Muy recientemente, V.Sverak ([43]) ha encontrado al parecer una prueba de que tal situación es imposible, al menos en dimensión 2.

## 7. UN EJEMPLO DE TRANSFORMACIÓN CUBICA-TETRAGONAL.

Nos disponemos en esta sección a aclarar en un caso particular bien conocido todas las ideas desarrolladas en la sección anterior. En realidad esto es un trabajo arduo que no está ni mucho menos completo, incluso en situaciones sencillas como la que vamos a tratar.

Parte del material de esta sección puede encontrarse en [1] y [32].

Consideramos como en secciones precedentes materiales que experimentan transformaciones martensíticas reversibles. En concreto nos centramos en la aleación Indium-Thallium (InTl). El cambio de estructura cristalina asociado con dicho material es, según hemos dicho con anterioridad, de cúbica centrada en las caras a tetragonal centrada en las caras. Dicho cambio de estructura puede describirse, considerando la fase cúbica como referencia, mediante la deformación  $y = U_0 x$ ,  $x \in \Omega$ , donde  $\Omega$  es la región del espacio que ocupa la muestra (o más precisamente la configuración de referencia) y  $U_0$  es la matriz simétrica definida positiva

$$U_0 = v_1 \mathbf{1} + (v_2 - v_1) e \otimes e,$$

siendo  $e$  el vector unitario que indica la dirección espacial de la dilatación, y  $v_1 \neq v_2$  constantes específicas. En aleaciones de tipo InTl,  $v_1 = 1 - \epsilon$ ,  $v_2 = 1 + 2\epsilon$ , y para concentraciones del 20% de Tl,  $\epsilon$  es alrededor de 0.013.

Debido a la invarianza de observador y la simetría asociada con la red cúbica, desde el punto de vista energético las matrices  $QR^T U_0 R$  siendo  $Q \in SO(3)$  y  $R \in P^V$ , el grupo puntual asociado a la red cúbica, son similares. En este caso ya hemos apuntado que  $P^V$  consta de las 24 rotaciones que dejan invariantes un cubo, pero de las  $R^T U_0 R$ ,  $R \in P^V$  sólo hay tres matrices distintas,  $U_1, U_2, U_3$  correspondientes a las tres variantes de martensita. En la temperatura en la que tiene lugar la transformación, todas las fases del cristal son estables: las tres variantes de martensita y la única variante de austenita asociada a la matriz  $\mathbf{1}$ . Disponemos en total de cuatro pozos de potencial de acuerdo con la terminología de la sección 3, que podemos representar esquemáticamente según la figura 7.1.

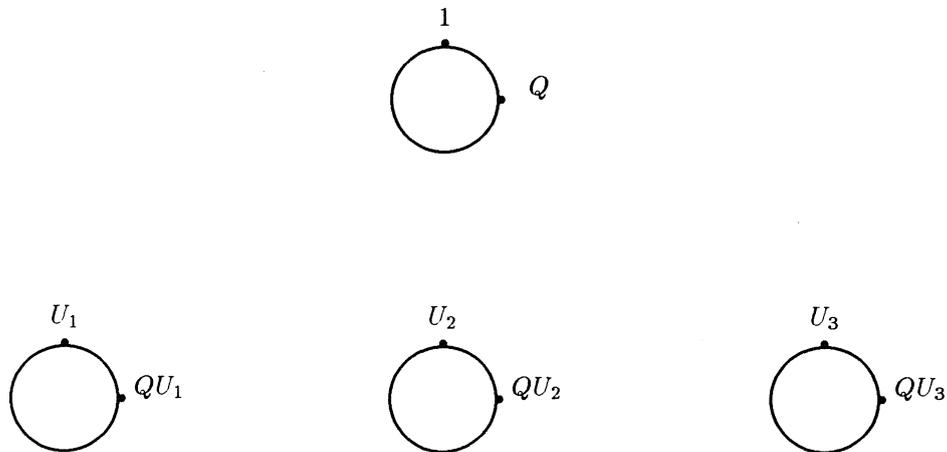


Figura 7.1

Si  $W$  representa la energía interna para esta clase de aleaciones supuesta la temperatura fija en el punto de transición, y  $K$  es la unión de los cuatro pozos de potencial, entonces suponemos que

$$W(F) = 0, \quad \forall F \in K,$$

$$W(F) > 0, \quad \forall F \notin K,$$

de modo que cada laminado con soporte en  $K$  corresponderá a una posible microestructura para tal aleación que tendrá por tanto mínima energía. Se trata, pues, de encontrar todos los posibles laminados cuyo soporte esté contenido en el conjunto de pozos de potencial correspondiente a la función energía interna. Como en la formación de estos laminados juega un papel fundamental las conexiones de rango uno, hemos de descubrir éstas entre las matrices de los distintos pozos. Algunas conclusiones conocidas son las siguientes.

1. No es posible formar microestructuras con matrices del mismo pozo. En particular, no hay interfases austenita/austenita.

2. No hay conexiones de rango uno entre una matriz del pozo correspondiente a 1 y otra de cualquiera de los otros tres pozos, de modo que no existen interfases austenita/martensita.

3. Siempre hay conexiones de rango uno entre los pozos correspondientes a  $U_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ , luego hay interfases martensita/martensita. Este tipo de interfases correspondería a una microestructura o laminado en el que participan sólo dos matrices, o cuyo soporte consta únicamente de dos matrices (figura 7.2).



Figura 7.2

4. Si suponemos que  $\text{rango}(U_1 - QU_2) = 1$ , para alguna rotación  $Q$ , es posible encontrar  $\theta \in (0, 1)$  de modo que

$$\text{rango}(Q' - (\theta U_1 + (1 - \theta)QU_2)) = 1, \quad Q' \in SO(3).$$

Así podemos construir un laminado  $\mu$  tal que

$$\mu = \lambda \delta_{Q'} + (1 - \lambda) \theta \delta_{U_1} + (1 - \lambda)(1 - \theta) \delta_{QU_2},$$

en el que participan tres matrices:  $Q'$ ,  $U_1$  y  $QU_2$ . Gráficamente se trata de la situación representada en la figura 7.3.

La microestructura sería algo como en la figura 3.2, cuando las escalas relativas se mantienen pero la escala real tiende a 0. Macroscópicamente, el cristal exhibiría un comportamiento dado por el primer momento de  $\mu$ , al que llamamos deformación subyacente a la microestructura. En este caso esta deformación es

$$F = \lambda Q' + (1 - \lambda) \theta U_1 + (1 - \lambda) (1 - \theta) Q U_2$$

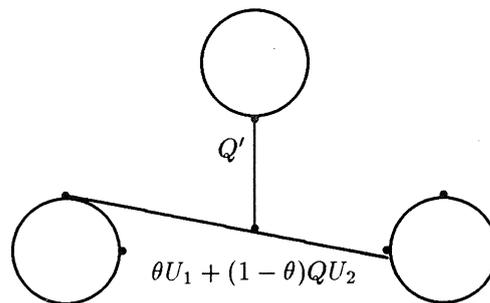


Figura 7.3

5. A partir de ahora e imitando el desarrollo de la sección anterior, podríamos encontrar matrices en  $K$  que presentan conexiones de rango uno con  $F$  dada por la fórmula anterior, o incluso situaciones más complicadas en que laminados con estructura de árbol como en las figuras 6.4, 6.5, 6.2 ó 6.6 acaban en matrices de  $K$ . Todas estas serían microestructuras admisibles para el cristal. A medida que más y más matrices participan, la microestructura tiene que refinarse para dar lugar, en el mecanismo de bandas sobre bandas, a que aparezcan todas las matrices. Experimentalmente se han observado hasta bandas dentro de bandas. Véanse las microfotografías en las referencias [3], [6] y [44].

6. El proceso anterior puede llevarse de hecho hasta el límite, y conseguir laminados continuamente distribuidos, en el que por tanto, todo un continuo de matrices de los pozos participa en la microestructura. Esto se ha probado en el contexto del problema de los dos pozos en dimensión 2, en donde se supone que la energía interna presenta únicamente dos pozos que son compatibles, es decir, rango  $(A-B) = 1$  para un par de matrices  $A$  y  $B$ , una de cada pozo. No es difícil comprobar que si los pozos fueran incompatibles, esto es, no hubiera conexiones de rango uno, entonces no puede haber microestructura. Referimos al lector a [32].

Información más detallada para este tipo de materiales se encuentra en [1] y estudios similares al que hemos resumido en esta sección para transformaciones cúbica-tetragonal, cúbica-ortorómbica y ortorómbica-monoclínica, como también comparación con otras teorías cristalográficas se encuentran en [2]. Cuestiones similares interesantes desde el punto de vista experimental en donde se discute el acuerdo entre teoría y experimento son [4], [5] y [36].

## 8. DIRECCIONES POSTERIORES.

Aunque el presente trabajo analiza y aclara la naturaleza de las microestructuras mecánicas que surgen en el estudio de transiciones de fase en sólidos cristalinos, quedan preguntas que merecen y requieren un análisis más detallado. Quizá la principal y más urgente, pero posiblemente también la más difícil de tratar, es decidir si pueden haber microestructuras de una naturaleza distinta de los laminados. O dicho de otro modo, si existen medidas de Young gradientes que no son laminados. Como hemos insistido en varias ocasiones esto es equivalente a decidir si quasiconvexidad y convexidad de rango uno son el mismo tipo de convexidad. La importancia de resolver esta cuestión nunca se apreciará lo suficiente, y no solamente desde el punto de vista de las microestructuras. Baste decir que probablemente llevaría varios años acabar de explicitar todas las consecuencias inmediatas de este hecho. Constantemente se estarían descubriendo nuevas consecuencias y aplicaciones. \*

Es posible, sin embargo, que este problema tenga más trascendencia teórica que práctica. Imaginemos por un momento que las condiciones ambientales se han elegido de modo que el problema variacional admite solución clásica, esto es, existe una deformación  $u$  que nos da la mínima energía y además podemos considerar la medida parametrizada homogénea

asociada  $v = \overline{\delta v u}$ . Si esta medida  $v$  es un laminado, en la mayoría de los casos necesitaríamos un proceso infinito de condiciones  $(H_n)$  para acercarnos a  $v$ . La pregunta es: ¿por qué o bajo qué condiciones elegiría el material este proceso infinito de estados en lugar del estado simple dado por  $u$ , supuesto los dos serían igual de caros desde el punto de vista energético?. Esta pregunta es difícil de responder. En verdad, hay otras preguntas de este tipo que aún no se saben dilucidar tampoco. Cuando no hay unicidad de microestructura, es decir, cuando dos laminados distintos pueden ser solución de un mismo problema, ¿qué es lo que determina el que el material elija uno u otro? Es algo que aún no se entiende bien, y quizás haya que considerar el carácter dinámico de los procesos de transiciones de fase para poder aclarar estas cuestiones. Esto, un modelo dinámico, es una de las grandes corrientes que empiezan a ser consideradas en la actualidad.

Otra corriente que está surgiendo y en la que ya hay algún trabajo es mejorar el modelo variacional incluyendo energías superficiales o interfásicas. No se conoce muy bien como toda la teoría de medidas de Young podría ayudar en este nuevo contexto. Pero está claro que acercarnos a la realidad exige este tipo de contribuciones energéticas. También se están empezando a estudiar microestructuras magnéticas o mecánico-magnéticas en el contexto del micromagnetismo y dominios

\* Muy recientemente V. Sverek ha probado que convexidad de rango uno no implica quasiconvexidad. Como en tantas ocasiones, su prueba origina más preguntas que respuestas.

estructurales en materiales ferromagnéticos y fenómenos de magnetostricción.

## 9. CONCLUSIÓN.

Ha sido nuestro empeño y afán al preparar la presente memoria el proporcionar nuevos motivos y razones para profundizar en un convencimiento, cada vez más consciente, de la utilidad de la ciencia y los modelos abstractos en la tarea humana por excelencia de conocer y dominar la naturaleza, a la vez que hacer uso de este dominio en favor del propio hombre. En este caso, nos hemos centrado en el Cálculo de Variaciones como herramienta de acercamiento a fenómenos naturales muy concretos, para intentar conocer y profundizar en el mecanismo de comportamiento de los sólidos y poder preverlo y controlarlo. Creemos haber hecho suficiente hincapié en la razón de ser del Cálculo de Variaciones como técnica basada en el principio de minimización de energía. Puesto que hay más que suficiente evidencia de que este mismo principio rige la Naturaleza, no es extraño ni sorprendente su utilidad en la construcción de modelos y mecanismos de comportamiento.

Pero el uso del Cálculo de Variaciones no se reduce a las Ciencias Físicas, en donde el principio es el de minimización de energía, sino más recientemente a la Teoría Económica, en donde el principio será el de maximizar la satisfacción o bienestar. O más en general en el contexto de la teoría del Control Optimo. Los mismos esquemas siguen siendo válidos, pues a fin de cuentas se trata de nuevo de un problema de optimización, aunque la problemática puede tener un carácter distinto del descrito en esta memoria. Sin duda se seguirán descubriendo nuevas situaciones o variaciones más completas de las ya conocidas que exigirán nuevos avances en los métodos y en las ideas. Esta es la tarea del investigador, a veces gozosa, a veces paciente y en ocasiones difícil.

## 10. BIBLIOGRAFIA.

- [1] J.M. BALL and R. JAMES, *Fine phase mixtures as minimizers of energy*, Arch. Rat. Mech. Anal., 100 (1987), 15-52.
- [2] J.M. BALL, and R. JAMES, *Proposed experimental tests of a theory of fine microstructure and the two well problem*, Phil. Trans. R. Soc. Lond. A. 338 (1992), 389-450.
- [3] Z.S. BASINSKI and J.W. CHRISTIAN, *Crystallography of deformation by twin boundary movements in indium-thallium alloys*, Acta Met. 2 (1954), 101-116; also, *Experiments on the martensitic transformation in single crystals of indium-thallium alloys*, Acta Met. 2 (1954), 148-166.
- [4] K. BATTACHARYA, *Self accommodation in martensite*, (en prensa).

- 
- [5] K. BATTACHARYA, *Wedge-like microstructure in martensite*, Acta Metall. Mater. 39 (1991), 2431-2444.
- [6] K.A. BYWATER and J.W. CHRISTIAN, *Martensitic transformations in titanium-tantalum alloys*, Phil. Mag. 25 (1972), 1249-1272.
- [7] M. CHIPOT and C. COLLINS, *Numerical approximation in variational problems with potential wells*, (en prensa).
- [8] M. CHIPOT and D. KINDERLEHRER, *Equilibrium configurations of crystals*, Arch. Rat. Mech. Anal., 103 (1988), 237-277.
- [9] C. COLLINS and M. LUSKIN, *The computation of the austenitic-martensitic phase transition*, PDE's and continuum models of phase transitions, Lecture Notes in Physics, 344 (1989), (Rascle, M., Serre, D., and Slemrod, M., eds) Springer, 34-50.
- [10] C. COLLINS and M. LUSKIN, *Numerical modelling of the microstructure of crystals with symmetry-related variants*, Proc. ARO US-Japan Workshop on Smart/Intelligent Materials and Systems, Technomic.
- [11] C. COLLINS and M. LUSKIN, *Optimal order error estimates for the finite element approximation of the solution of a nonconvex variational problem*, (en prensa).
- [12] C. COLLINS, D. KINDERLEHRER and M. LUSKIN, *Numerical approximation of the solution of a variational problem with a double well potential*, SIAM J. Numer. Anal., 28, n° 2 (1991), 321-332.
- [13] B. DACOROGNA, *Remarques sur les notions de polyconvexité, quasi-convexité et convexité de rang 1*, J. Math. Pures Appl., 64 (1985), 403-438.
- [14] B. DACOROGNA, *Direct Methods in the Calculus of Variations*, Springer, 1989.
- [15] J.L. ERICKSEN, *On the symmetry of deformable crystals*, Arch. Rat. Mech. Anal., 72 (1979), 1-13.
- [16] J.L. ERICKSEN, *Some phase transitions in crystals*, Arch. Rat. Mech. Anal., 73 (1980) 99-124.
- [17] J.L. ERICKSEN, *Changes in symmetry in elastic crystals*, IUTAM Symp. Finite Elasticity (Carlson, D.E. and Shiedl R.T., eds) M. Nijhoff (1981), 167-177.
- [18] J.L. ERICKSEN, *Ill posed problems in thermoelasticity theory*, Systems of Nonlinear Partial Differential Equations (Ball, J., ed) D. Reidel (1983), 71-95.
- [19] J.L. ERICKSEN, *The Cauchy and Born hypotheses for crystals*, Phase Transformations and Material Instabilities in Solids, (Gurtin, M., ed) Academic Press (1984), 61-78.
- [20] J.L. ERICKSEN, *Constitutive theory for some constrained elastic crystals*, Int. J. Solids Structures, 22 (1986), 951-964.

- 
- [21] J.L ERICKSEN, *Stable equilibrium configurations of elastic crystals*, Arch. Rat. Mech. Anal., 94 (1986), 1-14.
- [22] J.L ERICKSEN, *Twining of crystals I, Metastability and Incompletely Posed Problems*, IMA Vol. Math. Appl. 3, (Antman, S., Ericksen, J.L., Kinderlehrer, D., and Müller, I., eds) Springer (1987), 77-96.
- [23] N.B. FIROOZYE, *Optimal Translations and Relaxations of some Multiwell Energies*, PhD Thesis, Courant Institute, New York University, 1990.
- [24] N. B. FIROOZYE, *Optimal Use of the Translation Method and Relaxations of Variational Problems*, Comm. Pure Appl. Math. 44 (1991), 643-678.
- [25] I. FONSECA, *Variational methods for elastic crystals*, Arch. Rat. Mech. Anal. 97 (1987) 189-220.
- [26] I. FONSECA, *The lower quasi-convex envelope of the stored energy function for an elastic crystal*, J. Math. Pures Appl. 67 (1988) 175-195.
- [27] M. E. GURTIN, *On phase transitions with bulk, interfacial, and boundary energy*, Arch. Rat. Mech. Anal. 96 (1986) 243-264.
- [28] R.D. JAMES, *Microstructure and weak convergence*, Proc. Symp. Material Instabilities in Continuum Mechanics, Heriot-Watt, (Ball, J.M., ed.), Oxford (1988), 175-196.
- [29] R.D. JAMES and D. KINDERLEHRER, *Theory of diffusionless phase transitions, PDE's and continuum models of phase transitions*, Lecture Notes in Physics, 344 (Rascle, M., Serre, D., and Slemrod, M., eds.) Springer (1989), 51-84.
- [30] D. KINDERLEHRER, *Remarks about the equilibrium configurations of crystals*, Proc. Symp. Material instabilities in continuum mechanics, Heriot-Watt (Ball, J.M., ed.) Oxford (1988), 217-242.
- [31] D. KINDERLEHRER and P. PEDREGAL, *Characterizations of gradient Young measures*, Arch. Rat. Mech. Anal, 115, (1991), 329-365..
- [32] D. KINDERLEHRER and P. PEDREGAL, *Remarks about Young measures supported on tow wells*, (en prensa).
- [33] D. KINDERLEHRER and P. PEDREGAL, *Weak convergence of integrands and the Young measure representation*, SIAM Journal on Mathematical Analysis. 23, n° 1, (1992),1-19.
- [34] R. V. KOHN, *The relationship between linear and non-linear variational models of coherent phase transitions*, Proc. of Seventh Army Conf. on Appl. Math. and computing, West Point, June 1989.
- [35] R.V.KOHN, *The relaxation of a Double-Well Energy*, Continuum Mech. and Thermodynamics 3 (1991), 981-1000.

- [36] J. MATOS, Young measures and the absence of fine microstructures in a class of phase transitions, *Euro.J.of Appl. Math.*, 3, (1992), 31-54.
- [37] J. MATOS, PhD Thesis, University of Minnesota.
- [38] C.B. MORREY, *Quasiconvexity and the lower semicontinuity of multiple integrals*, *Pacific J. Math* 2 (1959) 25-53.
- [39] C. B. MORREY, *Multiple Integrals in the Calculus of the Variations*, (Springer, Berlin, 1966).
- [40] P. PEDREGAL, *Laminates and Microstructure*, (en prensa).
- [41] P. PEDREGAL, PhD Thesis, University of Minnesota.
- [42] A. C. PIPKIN, *Elastic materials with two preferred states*, Preprint, Aug. 1989.
- [43] V. SVERAK, *On regularity for the Monge-Ampère equation without convexity assumptions*, (en prensa).
- [44] G. Van TENDELOO, J. Van LANDUYT and S. AMELINCKX, *The  $\alpha$ - $\beta$  phase transition in quartz and AIPO 4 as studied by electron microscopy and diffraction*. *Phys. Stat. Sol.* a33 (1976), 723-735.
- [45] L.C. YOUNG, *Lectures on the Calculus of Variations and Optimal Control Theory*, (Saunders, Philadelphia, 1969).