

CARACTERIZACIÓN DE BAND GAPS FONÓNICOS EN PANELES TIPO SÁNDWICH CONSIDERANDO INCERTIDUMBRE EN PROPIEDADES FÍSICAS DEL MATERIAL

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO

ESTEBAN RODOLFO VALENZUELA NÚÑEZ

PROFESORA GUÍA: VIVIANA MERUANE NARANJO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN: RAFAEL RUIZ GARCÍA RUBÉN FERNÁNDEZ URRUTIA

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por: ANID en proyecto FONDECYT 1210442

SANTIAGO DE CHILE 2022

CARACTERIZACIÓN DE BAND GAPS FONÓNICOS EN PANELES TIPO SÁNDWICH CONSIDERANDO INCERTIDUMBRE EN PROPIEDADES FÍSICAS DEL MATERIAL

El creciente desarrollo de la manufactura aditiva ha permitido la fabricación de materiales con arquitectura celular cada vez más complejos y con amplio potencial de aplicación según el objetivo deseado, debido a su gran eficiencia estructural (en comparación a los materiales tradicionales) por la relación entre alta resistencia y rigidez con respecto a la masa. Una importante aplicación de estos materiales corresponde a la fabricación de núcleos de paneles tipo sándwich.

Algunos materiales celulares pueden experimentar un fenómeno denominado band gap fonónico, que consiste en que el material no propaga ondas mecánicas al ser excitado en cierto rango de frecuencias, independiente de la dirección, gracias a los fenómenos de *Bragg* scattering y resonancia local.

El presente estudio da cuenta del efecto que tiene la incertidumbre en las propiedades físicas del material (asociada a procesos de manufactura por ejemplo) sobre el comportamiento de los band gaps fonónicos que presentan dos modelos computacionales de paneles tipo sándwich.

Los resultados finales corresponden a gráficos de probabilidad de excedencia tanto para el ancho del band gap y la frecuencia media del mismo. La probabilidad de excedencia (eje \boldsymbol{y} del gráfico) indica cuál es la probabilidad de que la variable en estudio (ancho y frecuencia media de banda) sea mayor que el valor dispuesto en el eje \boldsymbol{x} , denominado umbral. Se establece que en los casos estudiados las frecuencias medias a las cuales se presentan band gaps son muy altas para las aplicaciones de interés (industrias aeronáutica, automovilística, deportiva y de mantenimiento), sin embargo están dentro del rango del ultrasonido, siendo esta un área de investigación propuesta para evaluar aplicaciones de este tipo de metamateriales.

La principal utilidad de los gráficos de probabilidad de excedencia es que se puede apuntar a un objetivo de ancho o frecuencia media de banda y determinar la probabilidad de tener valores mayores a estos. Asimismo se puede establecer la probabilidad de que la variable de estudio se sitúe un rango establecido, siendo estas herramientas útiles para una eventual etapa de diseño del material en cuestión.

El llevar a cabo la propagación de incertidumbre es un paso más para acercar los modelos computacionales empleados a una posible realidad física, por tanto constituye un proceso fundamental en el estudio del fenómeno de band gap fonónico en paneles tipo sándwich.

Agradecimientos

Se me hace imposible plasmar en un documento todas las sensaciones y recuerdos que me invaden al momento de escribir estos últimos párrafos, en la despedida de este complejo y tan preciado proceso.

En orden ascendente de importancia, primero agradecer a Beauchef por haber forjado parte de mi carácter durante los largos siete años y medio de carrera.

En segundo lugar, gracias infinitas a todas y todos quienes estuvieron en menor o mayor medida. A las funcionarias y funcionarios de la facultad por su tremenda labor. A las amigas y amigos que dejó plan común. A las amigas y amigos que trajo el resto de la carrera, en especial a *Somos 12* por entregar lazos tan profundos y reales, ustedes saben quiénes forman parte del círculo verdadero.

Gracias a mi amor, Valentina, por haber llegado a entregarme tu amor tan profundo y real a esta última etapa de mi carrera y por sobre todo a mi vida.

Agradezco más que todo lo anterior el apoyo de mi familia: Félix, Jaime y Lilian. Gracias infinitas al amor que me entregaron papá y mamá durante toda la carrera, me facilitaron la vida un montón con su regaloneo, sobre todo en períodos complejos (jamás olvidaré los pancitos y panquecas que me hicieron mientras estudiaba, entre muchas otras cosas). Sin más que agregar, gracias por su constante entrega y presencia aún en tiempos difíciles, sepan que les llevo en mi alma por siempre.

TABLA DE CONTENIDO

1.	Intr	oducción	1
2.	Obj 2.1. 2.2.	etivos y alcances Objetivo general	2 2 2 2
3.	Ant	ecedentes	3
	3.1.	Metamateriales: paneles tipo sándwich	3
	3.2.	Band gap fonónico	5
		3.2.1. Teoría de estructura periódica	5
	3.3.	Propagación de incertidumbre	12
4.	Met	todología 1	.4
	4.1.	Consideraciones previas	14
		4.1.1. Consideraciones de los modelos	14
		4.1.2. Estructura con pirámide central	15
		4.1.2.1. Parámetros de diseño	16
		4.1.3. Estructura Kagome de base cuadrada	18
		4.1.3.1. Parámetros de diseño	19
	4.2.	Secuencia de actividades	21
		4.2.1. Cálculo de diagramas de banda en modelos FEM disponibles 2	21
		4.2.2. Evaluación del comportamiento de band gaps en zonas de interés 2	21
		4.2.3. Selección de zona de estudio útil	23
		4.2.4. Modelamiento y propagación de la incertidumbre en las propiedades	
		físicas sobre los band gaps	23
		4.2.5. Evaluación del efecto de la incertidumbre sobre band gaps 2	23
5.	Res	ultados y discusión 2	24
	5.1.	Band gaps fonónicos	24
		5.1.1. Recorrido predeterminado	24
		5.1.1.1. Estructura con pirámide central	24
		5.1.1.2. Estructura Kagome de base cuadrada	26
		5.1.2. Recorrido propuesto	27
	5.2.	Propagación de incertidumbre	34
		5.2.1. Distribuciones simuladas	34
		5.2.1.1. Estructura con pirámide central	34
		5.2.1.2. Estructura Kagome de base cuadrada	36

5.2.2.	Probabilidad de excedencia		42
6. Conclusion	nes	2	45
Bibliografía		2	47

Índice de imágenes

3.1.	Materiales naturales con arquitectura: pico de ave (superior) y hueso de ala de	
	ave (inferior) [3].	3
3.2.	Estructura de un panel tipo sándwich [7]	4
3.3.	Estructuras de núcleo en paneles tipo sándwich: tetraédrico (izquierda), textil	
	en diamante (centro) y panel de abeja hexagonal (derecha) [3]	5
3.4.	Ejemplos de celda. (a) Básica. (b) Unitaria [2]	6
3.5.	Tipos de enreiado. (a) Directo. (b) Recíproco [2].	6
3.6.	Simetría en enrejado recíproco. (a) Simetría horizontal. (b) Simetría horizontal	
0.0.	v vertical (c) Simetría horizontal vertical v en 45° (d) Contorno de la Zona	
	irreducible de Brillouin [2]	7
3.7	Regiones consideradas para imponer condiciones de borde sobre celda unitaria	•
0.11	cuadrada [2]	9
3.8	Eiemplo de diagrama de bandas (derecha) para un vector de onda definido en	0
0.0.	el contorno de la IBZ (izquierda) [11]	10
3.9	Eiemplo de band gan fonónico para una estructura periódica específica [2]	11
<i>J</i> . <i>J</i> . <i>A</i> 1	Vista explosionada celda unitaria de estructura con pirámide central [13]	15
4.1. 1 9	Vista explosionada celua unitaria de escuedura con piramide central [15] Colda unitaria estructura con pirámido contral (a) Vista superior plano x y (b)	10
4.2.	Vista latoral plano y z [13]	16
13	IBZ colda unitaria estructura con pirámido contral vista superior [12]	16
4.5.	Vista isométrica de elementos afinos en colda unitaria de estructura con pirémide	10
4.4.	vista isometrica de elementos annes en ceida unitaria de estructura con piramide	17
15	Cellular [15]	10
4.5.	Calda bégica estructura Kagema de bage quedrada (a) Vieta gunarior plana y y	10
4.0.	(b) Vista sigerátrica [12]	10
17	(b) Vista isometrica [15]	10
4.1.	Celua unitaria estructura Ragonie de base cuadrada. (a) vista superior piano x_{ij} (b) Vista lateral plano x_{ij} [12]	10
10	X-y. (b) Vista lateral piano y-2 [15]. \ldots X-intervention Kagama da baga quadrada [12]	10
4.0.	Vista explosionada de celda unitaria de estructura Ragone de base cuadrada [15].	19
4.9.	Ibz ceida unitaria de estructura Kagome de base cuadrada, vista superior [15].	19
4.10.	Elementos en celda basica de estructura Kagome de base cuadrada. (a) vista esperier plana $x x_{i}$ (b) Vista latoral plana $x x_{i}$ [12]	20
1 1 1	superior plano x-y. (b) vista lateral plano y-z $[15]$	20
4.11.	Parametros de diseno estructura Kagome de base cuadrada segun elementos de	00
4 10		20
4.12.	Recorrido predeterminado del vector de onda sobre discretización espacial del	00
4 1 0	contorno de la IBZ en plano x-y	22
4.13.	Recorrido propuesto de vector de onda sobre discretización espacial del contorno	00
F 1	e interior de la IBZ en plano x-y.	22
5.1.	Diagramas de banda estructura con pirámide central. (a) Primer band gap re-	<i>a</i> :
	lativo. (b) Segundo band gap relativo	24

5.2.	Diagrama de bandas para tercer band gap relativo en estructura con pirámide central	25
5.3.	Diagramas de banda estructura Kagome de base cuadrada. (a) Primer band gap relativo. (b) Segundo band gap relativo. (c) Tercer band gap relativo	26
5.4.	Primer band gap relativo estructura con pirámide central. (a) Diagrama de ban- das normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos	27
5.5.	Primer band gap relativo estructura Kagome de base cuadrada. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos.	28
5.6.	Tercer band gap relativo estructura Kagome de base cuadrada. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos.	29
5.7.	Diagrama de bandas sin band gap fonónico en estructura Kagome de base cua- drada. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores	
5.8.	de puntos extremos Cantidad y ubicación geométrica de puntos extremos de banda en grilla pro- puesta para estructura con pirémide contral (a) Méximos banda inferior (b)	31
5.9	Mínimos banda superior	32
0.01	puesta para estructura Kagome de base cuadrada. (a) Máximos banda inferior. (b) Mínimos banda superior.	32
5.10.	Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$.	34
5.11.	Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$.	35
5.12.	Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b)	<u>م</u> ۳
5.13.	$\alpha_2 = 0.1$ Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$	35 36
5.14.	Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada (a) $\alpha_1 = 0.05$ (b) $\alpha_2 = 0.1$	36
5.15.	Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.05$.	37
5.16.	Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$.	
5.17.	(b) $\alpha_2 = 0.1.$	37
F 10	primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$.	38
5.18.	Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para segundo band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$. (c) $\alpha_3 = 0.15$. (d) $\alpha_4 = 0.2$.	40
5.19.	Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para cuarto band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 =$	-0
	0.1. (c) $\alpha_3 = 0.15$. (d) $\alpha_4 = 0.2$	41

listintos	
e banda.	
	43
gún dis-	
ncho de	
4	44
gún gún nchc	 dis-) de

Índice de tablas

5.1.	Caracterización de band gaps en estructura con pirámide central.	25
5.2.	Caracterización de band gaps en estructura Kagome de base cuadrada	27
5.3.	Primeros 10 band gaps relativos según estructura y recorrido de vector de onda.	30
5.4.	Puntos extremos de diagramas de banda que no presentan band gap en estruc-	
	tura Kagome de base cuadrada.	30
5.5.	Coeficientes de variación de distribuciones simuladas según estructura, band gap	
	relativo y desviación estándar.	39

Capítulo 1 Introducción

Bostrom [1] plantea que las revoluciones tecnológicas (cambios drásticos provocados por la relativamente rápida introducción de una nueva tecnología) están dentro de los hechos más importantes que le pueden acontecer a la humanidad, no solo por ser en gran parte responsable de la evolución de los parámetros básicos de la condición humana (población mundial o nivel de educación, entre otros), sino porque también nos afectan directamente como sociedad, influyendo en las relaciones humanas, entretención e incluso gobernancia.

Ciertamente la manufactura aditiva es parte de una revolución tecnológica en la industria de la manufactura. Este método ha permitido la fabricación de materiales con arquitectura celular cada vez más complejos y con amplio potencial de aplicación según el objetivo deseado, debido a su gran eficiencia estructural (en comparación a los materiales tradicionales) por la relación entre alta resistencia y rigidez con respecto a la masa [2]. Una de las posibles aplicaciones de materiales celulares corresponde a la fabricación de núcleos de *paneles sándwich*. Este tipo de metamaterial se compone por un núcleo liviano, unido mediante adhesivo a dos capas exteriores relativamente delgadas en comparación pero de gran resistencia y rigidez, haciéndolos aptos para aplicaciones en ingeniería mecánica como las industrias aeronáutica, deportiva y automovilística [3].

Ciertos materiales celulares pueden experimentar un fenómeno denominado band gap fonónico, que consiste en que el material no propaga ondas mecánicas al ser excitado en cierto rango de frecuencias, independiente de la dirección, mediante los fenómenos de Bragg scattering y resonancia local [2][4]. Este fenómeno es de especial interés en las industrias antes mencionadas dado el alto nivel de confiabilidad que buscan sus aplicaciones, propiedad que puede ser obtenida entre otros factores gracias a la mitigación de propagación de ondas. Tal mitigación tiene potencial de ser aplicada en otras industrias, por ejemplo en la de mantenimiento, lo que podría tener efectos positivos tanto en lo económico como en seguridad, he ahí la importancia del estudio de este fenómeno en este tipo de material.

El presente estudio busca evaluar el comportamiento de los band gap fonónicos que se presentan en dos modelos computacionales de paneles sándwich, mediante la propagación de incertidumbre sobre las propiedades físicas del material que los componen. Esta incertidumbre se asocia por ejemplo a los procesos de manufactura tanto del material como de los paneles, y se considera un proceso fundamental en el estudio de cualquier sistema de ingeniería dado que el desempeño real puede diferir en mayor o menor medida frente al modelado.

Capítulo 2

Objetivos y alcances

2.1. Objetivo general

Caracterizar el comportamiento de los band gap fonónicos en paneles tipo sándwich considerando efectos de la incertidumbre del material.

2.1.1. Objetivos específicos

Para lograr el objetivo general se requiere:

- 1. Evaluar el comportamiento de los band gap fonónicos del material tanto en la Zona irreducible de Brillouin (IBZ) como en su contorno.
- 2. Seleccionar qué zona de estudio es más útil para la caracterización.
- 3. Cuantificar el efecto de la incertidumbre, asociada a las propiedades físicas del material, sobre los band gap.

2.2. Alcances

Para precisar el nivel de desarrollo de este trabajo es necesario mencionar que:

- 1. El estudio se realiza a partir dos modelos de paneles sándwich ya existentes.
- 2. Las propiedades físicas que van a caracterizar la incertidumbre corresponden al módulo de elasticidad y densidad del material.
- 3. El estudio emplea modelos numéricos, no implica un análisis experimental.

Capítulo 3

Antecedentes

En este capítulo se abordan los antecedentes teóricos que hacen posible una comprensión acabada del problema en estudio. Se lleva a cabo una revisión bibliográfica sólida en cuanto a los temas generales y específicos que involucran el trabajo actual.

3.1. Metamateriales: paneles tipo sándwich

Semánticamente el concepto de *metamaterial* proviene del prefijo griego *meta*, que significa "más allá de". Dicho esto, los metamateriales son aquellos que presentan propiedades y comportamientos inusuales en comparación a aquellos materiales que los constituyen. Se considera que los metamateriales obtienen sus propiedades gracias al ordenamiento o estructura que presentan más que a partir de los materiales que lo componen [5].



Figura 3.1. Materiales naturales con arquitectura: pico de ave (superior) y hueso de ala de ave (inferior) [3].

Dentro de esta categoría se posicionan los materiales con arquitectura (MA de ahora en adelante), que corresponden a aquellos materiales de multifase¹ o celulares ² en los cuales la distribución de las fases es cuidadosamente controlada y optimizada para obtener funciones o propiedades específicas [6]. Los MA están altamente presentes en la naturaleza gracias a miles de años de evolución frente a ciertas necesidades. Como ejemplo se toman las estructuras óseas de los picos y huesos de aves, caracterizadas por delgadas capas que envuelven un núcleo celular altamente poroso, otorgándoles así un bajo peso y alta rigidez (ver figura 3.1).

Aunque la especie humana he intentado recrear estas estructuras presentes en la naturaleza, los MA artificiales son mucho menos sofisticados. En esta línea de investigación el desarrollo de MA se presenta como la principal opción para conformar núcleos de *paneles tipo sándwich*.

Estos metamateriales se conforman por dos capas delgadas de un material rígido y resistente, unidas mediante capas adhesivas a un núcleo grueso, de bajo peso y menor resistencia y rigidez en comparación a las capas externas (ver figura 3.2). Como es de esperarse, estos paneles han de ser utilizados en aplicaciones que requieren materiales de bajo peso y alta resistencia, siendo de gran interés para industrias como la aeronáutica, automovilística y deporte de alto rendimiento, entre otras [3].

Cabe destacar que los núcleos de los paneles pueden adoptar distintas geometrías y disposiciones dependiendo de los objetivos de desempeño deseados. Ejemplos de esto se observan en la figura 3.3.



Figura 3.2. Estructura de un panel tipo sándwich [7].

¹ material compuesto por fases químicamente distintas y separadas por una superficie.

 $^{^{2}}$ materiales que ocupan el espacio mediante la auto-teselación de estructuras repetitivas.



Figura 3.3. Estructuras de núcleo en paneles tipo sándwich: tetraédrico (izquierda), textil en diamante (centro) y panel de abeja hexagonal (derecha) [3].

3.2. Band gap fonónico

Para comprender el fenómeno de los *band gap fonónicos* primero es necesario abordar la formulación físico-matemática que hay detrás del problema en cuestión.

3.2.1. Teoría de estructura periódica

Se considera que los *materiales celulares periódicos* están definidos por la repetición espacial de una **celda unitaria** irreducible, cuya topología afecta fuertemente las características de propagación de ondas elásticas [8]. La celda unitaria a su vez puede estar conformada por la repetición de celdas básicas³.

Otra definición similar pero aún necesaria corresponde a la de cristales fonónicos, estructuras compuestas por un arreglo periódico de *disipadores* (partículas por ejemplo) que afectan la propagación de ondas acústicas o elásticas. El término *fonónico* proviene de la excitación elemental asociada a la partícula que define la onda vibracional, en este caso, el fonón (descripción cuántica de la vibración de un enrejado) [4][9].

Para efectos ilustrativos se muestran a continuación una celda básica y unitaria de una estructura periódica. La celda básica se compone de seis elementos lineales (o viga, representados por línea continua negra) y cuatro nodos (puntos grises) tal como se observa en la figura 3.4.a. Una celda unitaria se compone mediante el ordenamiento de n_x y n_y celdas básicas, que corresponden al número de unidades dispuestas en el eje $\boldsymbol{x} \in \boldsymbol{y}$, respectivamente, si es que el sistema se describe con ejes de coordenadas cartesianas. Como se observa en la figura 3.4.b, tal celda unitaria queda descrita con $n_x = n_y = 4$. Luego, la periodicidad de la estructura se obtiene al imponer las condiciones de borde periódicas sobre la celda unitaria.

³ Si bien la celda unitaria puede estar conformada por celdas básicas iguales en forma, pueden diferir en sus propiedades físicas y por tanto estas no pueden ser las unidades irreducibles del material.



Figura 3.4. Ejemplos de celda. (a) Básica. (b) Unitaria [2].

Se definen los vectores⁴ base de enrejado directo como $\mathbf{t_1}$ y $\mathbf{t_2}$, tal como ilustra la figura 3.5.a. La dimensión de la celda queda definida por la longitud de sus lados, L.

De manera similar, el enrejado recíproco presenta sus vectores base $\mathbf{T_1}$ y $\mathbf{T_2}$, cada uno perpendicular a $\mathbf{t_2}$ y $\mathbf{t_1}$ respectivamente (ver figura 3.5.b). La longitud de los lados de esta celda es de $2\pi/L$.



Figura 3.5. Tipos de enrejado. (a) Directo. (b) Recíproco [2].

Cabe mencionar que la definición de los sistemas coordenados sirve para conocer la posición de cualquier partícula dentro del dominio del enrejado [10] y es notable que ambos sistemas de coordenadas se sitúan en el centro de las celdas unitarias.

⁴ de aquí en adelante la notación de vectores viene dada por la fuente en negrita. Para definiciones de matrices con este estilo de fuente, se explicitará en el texto.

En el ejemplo anterior el enrejado recíproco tiene tres tipos de simetría: (1) horizontal, (2) vertical y (3) en 45°. Así, la Zona irreducible de Brillouin (IBZ por sus siglas en inglés) se genera por la aplicación de las simetrías en forma consecutiva, tal como se observa en la figura 3.6.c. Sobre su contorno triangular (figura 3.6.d) se define el vector de onda \mathbf{k} , demarcado en rojo.

Este vector recorre el borde de la IBZ partiendo en Γ , pasando por X y M para nuevamente volver a Γ . Los beneficios de estudiar esta zona reducida son, aparte de reducir el costo computacional de los cálculos, que la estructura queda completamente definida gracias a las simetrías impuestas sobre la celda unitaria.



Figura 3.6. Simetría en enrejado recíproco. (a) Simetría horizontal. (b) Simetría horizontal y vertical. (c) Simetría horizontal, vertical y en 45°. (d) Contorno de la Zona irreducible de Brillouin [2].

Asumiendo la periodicidad de la celda unitaria como se mencionó anteriormente, la teoría de ondas *Floquet-Bloch* establece que el desplazamiento periódico en el espacio recíproco viene dado por

$$\mathbf{u}(\mathbf{X} + \mathbf{r}) = \mathbf{u}(\mathbf{X})e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})}$$
(3.1)

donde **r** corresponde a la periodicidad de la celda, **u** el desplazamiento en función de la posición **X**, **k** el vector de onda e *i* el número imaginario. De este modo el vector de onda entrega a esta ecuación cualquier modo de periodicidad con respecto a la periodicidad **r**.

El vector de onda se define como

$$\mathbf{k} = ksen\theta \hat{I} + kcos\theta \hat{J} \tag{3.2}$$

donde k es la magnitud, θ el ángulo relativo a la dirección horizontal, \hat{I} el vector unitario de la dirección horizontal y \hat{J} el de la vertical.

Para imponer las condiciones de borde sobre una celda unitaria cuadrada se deben tener en consideración las regiones que se observan en la figura 3.7, con lo cual

$$\mathbf{u}_{T} = \mathbf{u}_{B} e^{iLk\cos\theta}$$

$$\mathbf{u}_{R} = \mathbf{u}_{L} e^{iLksen\theta}$$

$$\mathbf{u}_{BR} = \mathbf{u}_{BL} e^{iLk\cos\theta}$$

$$\mathbf{u}_{TL} = \mathbf{u}_{BL} e^{iLksen\theta}$$

$$\mathbf{u}_{TR} = \mathbf{u}_{BL} e^{iLk(\cos\theta + sen\theta)}$$
(3.3)

donde los vectores \mathbf{u}_L , \mathbf{u}_R , \mathbf{u}_B y \mathbf{u}_T representan a los conjuntos de nodos sobre las lineas izquierda, derecha, inferior y superior respectivamente (los subíndices L, R, B y T provienen del inglés *left*, *right*, *bottom* y *top* respectivamente). Los vectores recién mencionados no consideran los nodos presentes en las esquinas, por lo cual estos tienen su propia notación de posición según una combinación de los subíndices: \mathbf{u}_{TL} para superior izquierdo, \mathbf{u}_{TR} para superior derecho, \mathbf{u}_{BL} para inferior izquierdo y \mathbf{u}_{BR} para inferior derecho. Por último, todos los nodos internos están considerados en el vector \mathbf{u}_I



Figura 3.7. Regiones consideradas para imponer condiciones de borde sobre celda unitaria cuadrada [2].

De esta forma se puede reducir el número de nodos independientes con una relación de la forma $\mathbf{u} = \mathbf{T}\tilde{\mathbf{u}}$, donde \mathbf{u} es el vector de todo el desplazamiento nodal, $\tilde{\mathbf{u}}$ el vector reducido y \mathbf{T} la matriz que relaciona a ambos. Estos términos se expresan matemáticamente como

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{L} \\ \mathbf{u}_{R} \\ \mathbf{u}_{B} \\ \mathbf{u}_{T} \\ \mathbf{u}_{BL} \\ \mathbf{u}_{TL} \\ \mathbf{u}_{BR} \\ \mathbf{u}_{T} \\ \mathbf{u}_{I} \end{bmatrix} , \quad \tilde{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_{L} \\ \mathbf{u}_{B} \\ \mathbf{u}_{BL} \\ \mathbf{u}_{I} \end{bmatrix}$$
(3.4)
$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{I}e^{iLksen\theta} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{I}e^{iLkcos\theta} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}e^{iLkcos\theta} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}e^{iLkcos\theta} & \mathbf{I} \\ \mathbf{I} & \mathbf{I} \end{bmatrix}$$

Teniendo estas definiciones y considerando la periodicidad es posible escribir el problema de valores y vectores propios como se muestra a continuación

$$(\mathbf{T}^T \mathbf{K} \mathbf{T} - \omega_i^2 \mathbf{T}^T \mathbf{M} \mathbf{T}) \mathbf{u}_i = 0$$
(3.6)

o bien

$$(\mathbf{K}'(\mathbf{k}) - \lambda_i \mathbf{M}'(\mathbf{k}))\mathbf{u}_i = 0 \tag{3.7}$$

donde **K** y **M** son las matrices de rigidez y masa global, respectivamente, λ_i el i-ésimo valor propio ($\lambda_i = \omega_i^2$) y **u**_i corresponde al i-ésimo modo de vibración (vector propio) asociado al respectivo vector de onda [2].

Habiendo caracterizado física y matemáticamente el problema de vibración en la estructura periódica, es posible presentar el diagrama de bandas en el cual se observa el fenómeno de *band gap fonónico*.

A un determinado vector de onda se le pueden calcular m soluciones del problema de valores y vectores propios. Esta solución, o banda, corresponde a la frecuencia a la cual vibra el sistema en respuesta a la onda caracterizada por el vector en cuestión. En la figura 3.8 se observa el diagrama de bandas con 5 soluciones para un vector de onda que recorre el borde de la IBZ definida. Cabe mencionar que las m soluciones calculadas son una cantidad arbitraria y no puede superar al número de grados de libertad del sistema.



Figura 3.8. Ejemplo de diagrama de bandas (derecha) para un vector de onda definido en el contorno de la IBZ (izquierda) [11].

Existen ciertas estructuras que en determinado rango de frecuencias, independiente del vector de onda, no tienen una respuesta vibratoria significativa. Este fenómeno se evidencia cuando en el diagrama existe una zona sin bandas. A este rango de frecuencias se le denomina band gap fonónico, tal como se observa en el ejemplo de la figura 3.9.



Figura 3.9. Ejemplo de band gap fonónico para una estructura periódica específica [2].

3.3. Propagación de incertidumbre

La incertidumbre es una realidad presente en cualquier sistema de ingeniería dado que el desempeño de un producto o sistema real puede diferir en mayor o menor medida frente al del modelo, lo cual puede estar asociado a la incertidumbre propia de los procesos de manufactura o propiedades del material, por ejemplo. Dicho esto es posible establecer que la propagación de incertidumbre juega un rol fundamental en el proceso de diseño.

Supóngase que se busca caracterizar el comportamiento de un sistema o componente, denotado por $H(\theta)$, donde $H \in \mathbb{R}^{n_H}$ corresponde a una métrica de comportamiento determinista, mientras que $\theta \in \mathbb{R}^{n_{\theta}}$ corresponden a los parámetros que afectan la evaluación del comportamiento.

Dependiendo del sistema de estudio, si es que hay más de un parámetro que caracteriza el comportamiento, entonces θ puede ser representado como un vector. Asimismo, estos valores no poseen un valor único dada la incertidumbre propia que los caracteriza, es por esta razón que su comportamiento se modela con una función distribución de probabilidad (PDF) denotada como $p(\theta)$.

El punto de conexión entre el comportamiento y la incertidumbre de los parámetros que lo caracterizan, viene dado mediante la resolución de la integral probabilística, definida como

$$E[H] = \int H(\theta) \cdot p(\theta) d\theta \qquad (3.8)$$

donde E[H] representa el valor esperado de H luego de propagar la incertidumbre asociada a θ .

De manera similar, es posible calcular la probabilidad de que la métrica H esté por sobre un valor límite H_{lim} , según la siguiente expresión

$$P_F = P(H > H_{lim}) = \int I_F(\theta) \cdot p(\theta) d\theta$$
(3.9)

donde $I_F(\theta)$ es la función indicatriz que asume los valores de 0 o 1, dependiendo de si la métrica H está por debajo o sobre el valor límite respectivamente. A esta expresión se le conoce también como probabilidad de falla, y conviene aclarar que se declara como falla por superar el valor límite, no necesariamente corresponde a una falla mecánica.

La solución a una integral como la que se presenta en la ecuación 3.9 es compleja mediante métodos analíticos y además ineficiente (con métodos numéricos) para una dimensión del vector θ superior a tres. Es por esto que se emplea un método de simulación estocástica, particularmente el *Método de Monte Carlo*, cuyo funcionamiento se describe a continuación.

El primer paso de la aproximación consiste en generar K muestras que siguen la distribución $p(\theta)$, vector denotado como $\{\theta^j, j = 1, ..., K\}$. A continuación, se estima la salida (respuesta) del sistema frente a cada muestra anteriormente obtenida, generando el vector $\{I_F(\theta^j), j = 1, ..., K\}$. Empleando el *Teorema de Límite Central*, la estimación del método de Monte Carlo para la probabilidad de falla, \hat{P}_F , viene dada por:

$$\hat{P}_F \approx \frac{1}{K} \sum_{i=1}^K I_F(\theta^j) \tag{3.10}$$

que corresponde al promedio de las respuestas del sistema generadas por las K muestras. Se puede demostrar que la aproximación anterior se transforma en una igualdad a medida que el número de muestras tiende a infinito, por tanto mientras mayor sea K, más precisa será la aproximación [12].

Capítulo 4 Metodología

Para llevar a cabo una investigación es necesario definir cómo abordar el problema con tal de que se cumplan los objetivos planteados en un comienzo. Con este fin se enseña la metodología de trabajo, que corresponde a la implementación práctica de tareas que permiten lograr tal cometido. A continuación se da a conocer la serie de actividades y consideraciones que se tuvieron durante la realización del estudio.

4.1. Consideraciones previas

Como se estableció en la sección 2.2, el estudio empleó dos modelos de elementos finitos (FEM por sus siglas en inglés) desarrollados en [13], los cuales ya tenían su topología y cálculo de band gaps implementados en el software MATLAB®, mediante el toolbox⁵ Structural Dynamics Toolbox (SDT). Para dar un mejor contexto a la lectora y lector, se describen a continuación los modelos FEM empleados.

4.1.1. Consideraciones de los modelos

- 1. Las placas exteriores de los paneles sándwich se modelan mediante elementos *shell*, que corresponden a cuadriláteros planos de cuatro nodos⁶, uno por cada esquina.
- 2. El enrejado de los paneles se modela mediante elementos viga (*beam* en inglés) unidimensionales de dos nodos, uno en cada extremo. Aún siendo unidimensionales, poseen un radio de sección circular que los caracteriza (ver secciones 4.1.2.1 y 4.1.3.1).
- 3. Se asume que las placas exteriores y el enrejado de los modelos están perfectamente unidos entre sí, evitando modelar un adhesivo entre las partes.
- 4. Las propiedades físicas que se modelaron con incertidumbre fueron la densidad y el módulo de elasticidad. Se tomó el supuesto de que el material de las placas y el enrejado corresponde a acero genérico con los siguientes valores nominales, en unidades del Sistema Internacional de Unidades (SI):

 $^{^5}$ corresponde a un conjunto de funciones implementadas en un lenguaje de programación en particular, diseñadas para aplicaciones específicas del ámbito científico.

⁶ la definición de nodos viene de la teoría FEM y corresponden a la forma de discretizar el modelo digital que se trabaja. Para mayor detalle de la formulación, consultar [13].

- Densidad: $\rho = 7800 \left[\frac{kg}{m^3}\right]$
- Módulo de elasticidad: $E = 2.1 \cdot 10^{11}$ [Pa]
- 5. Los paneles corresponden a objetos tridimensionales, por lo que de acuerdo a la notación entregada en 3.2.1, también se define un factor asociado al número de celdas básicas que componen la celda unitaria, n_z . En los dos modelos que se emplean en este estudio se utilizó $n_z = 1$.
- 6. Para el cálculo de band gaps se consideró un factor de altura de celda unitaria nulo, por tanto los vectores de onda quedaron definidos en el eje x-y.

4.1.2. Estructura con pirámide central

Esta estructura se conforma de una celda unitaria que coincide con su celda básica, por tanto conforme la notación entregada en 3.2.1 la celda queda caracterizada con $n_x = n_y = 1$ (ver figura 4.1).



Figura 4.1. Vista explosionada celda unitaria de estructura con pirámide central [13].

Se definen los largos y ancho de la celda como L_x y L_y respectivamente. Para este caso la celda es cuadrada, por lo que se define una única medida de longitud igual al largo y ancho, denotada por L_c . Además se define la altura de la celda unitaria, L_z , que para esta estructura corresponde a $L_z = L_c/3$.



Figura 4.2. Celda unitaria estructura con pirámide central. (a) Vista superior plano x-y. (b) Vista lateral plano y-z [13].

Tal como se puede observar en la figura 4.2.a, la celda fue diseñada con tal de poder aplicar las simetrías necesarias que generan una IBZ triangular (ver figuras 3.6.d y 3.8) y además poder aplicar las condiciones de borde periódicas.

Se puede apreciar en las figuras 4.1 y 4.2 que la pirámide central está compuesta de ocho elementos viga, de los cuales se extienden "patas" triangulares (también conformadas por elementos viga) que terminan en los cuatro vértices y puntos medios de las cuatro aristas de la celda unitaria.

4.1.2.1. Parámetros de diseño

Según lo establecido anteriormente, la celda posee simetría con respecto al eje vertical, horizontal y diagonal como puede observarse con líneas punteadas en la figura 4.3. En ella se presentan en diferentes colores los elementos que, de acuerdo a estas simetrías, poseen las mismas propiedades físicas según la geometría de la celda. A estos se les denomina *elementos afines* (ver figura 4.4).



Figura 4.3. IBZ celda unitaria estructura con pirámide central, vista superior [13].

El núcleo de la celda se compone de 24 elementos viga y evidentemente 6 de ellos se encuentran en la IBZ, demarcada con sombreado gris en la figura 4.3. Dicho esto, los parámetros de diseño que caracterizan a la celda corresponden a los factores que modifican los radios \mathbf{r} de cada elemento viga, denotados por f_i , con $i = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$. Estos se denominan factores de radio y pueden tomar valores continuos entre 0.5 y 2. Corresponden a una variable de diseño dado que modifican propiedades físicas y geométricas de acuerdo a las siguientes expresiones:

$$A_i = \pi \cdot (f_i \cdot r)^2 \tag{4.1}$$

$$I_{x,i} = I_{y,i} = \frac{\pi \cdot (f_i \cdot r)^4}{4}$$
(4.2)

$$J_i = I_{x,i} + I_{y,i} (4.3)$$

con $r = 8 \cdot 10^{-4}$ [m]. La variable A corresponde al área de sección transversal del elemento, $I_x \in I_y$ a los segundos momentos de área y J al momento de torsión. Los subíndices *i* indican que estas propiedades corresponden a cada uno de los elementos viga en la IBZ.



Figura 4.4. Vista isométrica de elementos afines en celda unitaria de estructura con pirámide central [13].

Otro factor de diseño es el denominado factor de altura f_L , que varía la separación de las placas L_z , sin embargo a lo largo del estudio es constante y toma el valor de 1, por ende la separación entre placas también es constante. El último factor de diseño corresponde al que varía la longitud de los lados de la celda unitaria, L_c , de acuerdo a la siguiente ecuación

$$L_c = (1 + f_c) \cdot 0.015 \quad [m] \tag{4.4}$$

con f_c el factor de arista que puede tomar valores continuos entre 0 y 1.

De manera ilustrativa se muestra a continuación la relación de cada uno de los factores de radio asociados a cada elemento presente en la IBZ.

 $f_1 f_2 f_3 f_4 f_5 f_6$

Figura 4.5. Parámetros de diseño estructura con pirámide central según elementos de la IBZ.

4.1.3. Estructura Kagome de base cuadrada

Esta arquitectura está conformada por una celda unitaria de tres celdas básicas en cada eje, es decir $n_x = n_y = 3$.



Figura 4.6. Celda básica estructura Kagome de base cuadrada. (a) Vista superior plano x-y. (b) Vista isométrica [13].

Como se puede ver en la figura 4.6, la celda básica se conforma de cuatro elementos viga que conectan los vértices opuestos de las placas superior e inferior (o viceversa) del panel, formando dos pirámides de base cuadrada (una invertida con respecto a la otra) que se tocan en sus cúspides. Se muestra a continuación el esquema de la celda unitaria:



Figura 4.7. Celda unitaria estructura Kagome de base cuadrada. (a) Vista superior plano x-y. (b) Vista lateral plano y-z [13].

En este caso la celda también es cuadrada y queda definida por los mismos parámetros que la estructura anterior: $(L_c = L_x = L_y)$ y $(L_z = L_y/3)$ para contar con celdas básicas cúbicas.



Figura 4.8. Vista explosionada de celda unitaria de estructura Kagome de base cuadrada [13].

4.1.3.1. Parámetros de diseño

Al igual que en la estructura con pirámide central, se observan en la figura 4.9 las simetrías de la celda unitaria de la estructura de Kagome que hacen posible tanto la distinción de la IBZ como la imposición de condiciones de borde periódicas.



Figura 4.9. IBZ celda unitaria de estructura Kagome de base cuadrada, vista superior [13].

La representación bidimensional de la celda es más compleja que el caso anterior por lo cual se presentan los siguientes esquemas:



Figura 4.10. Elementos en celda básica de estructura Kagome de base cuadrada. (a) Vista superior plano x-y. (b) Vista lateral plano y-z [13].

En ellos se observa que la celda básica (para esta representación, la superior izquierda de la celda unitaria) queda definida por 4 elementos viga, sin embargo 2 de ellos comparten propiedades físicas y geométricas dada la topología.

Los elementos que comparten propiedades son representados con una flecha bidireccional en el plano x-y, en cambio aquellos que no lo hacen se representan mediante flechas unidireccionales en sentidos opuestos, tal como se observa en la figura 4.10. Dicho esto, al haber 4 elementos por celda básica, la celda unitaria queda compuesta por 36 elementos y 6 de ellos presentes en la IBZ, demarcada con sombreado gris en la figura 4.9.

Dado que la formulación es similar para ambas estructuras, en este caso se mantiene la cantidad de factores de radio, el factor de altura f_L sigue siendo constante de valor 1 y el factor de arista f_c posee el mismo comportamiento. A continuación la representación de cada factor de radio asociado a cada elemento viga presente en la IBZ de esta estructura:

 $f_1 f_2 f_3 f_4 f_5 f_6$

Figura 4.11. Parámetros de diseño estructura Kagome de base cuadrada según elementos de la IBZ.

4.2. Secuencia de actividades

4.2.1. Cálculo de diagramas de banda en modelos FEM disponibles

Para evaluar el comportamiento de los diagramas de bandas primero es necesario seleccionar las combinaciones de parámetros que entregan los mayores **band gaps relativos**, con el fin de obtener una caracterización lo más clara posible. Las combinaciones se obtienen a partir de una base de datos de 20000 combinaciones de parámetros generadas con el método *Latin hypercube sampling*. El band gap relativo es una medida adimensional de cuan significativo es el ancho del band gap, $\Delta \omega$, con respecto a la frecuencia media que lo caracteriza, ω_{media} . Matemáticamente se expresa como

$$\omega_{relativo} = \frac{\Delta\omega[Hz]}{\omega_{media}[Hz]} = 2 \cdot \frac{\min(\omega_{n+1}) - \max(\omega_n)}{\min(\omega_{n+1}) + \max(\omega_n)}$$
(4.5)

donde ω_{n+1} y ω_n representan las bandas superior e inferior con las que se genera el band gap, respectivamente [13].

Para clarificar, supóngase que se tiene un ancho de banda de 100 [Hz]. En el caso de que la frecuencia media de la banda sea por ejemplo 500 [Hz] (es decir que, el mínimo de la banda superior y el máximo de la banda inferior que generan el band gap, promedian ese valor), es mucho más significativo que un caso en que la frecuencia media sea de 10000 [Hz], por ejemplo, pues el ancho en este caso es casi despreciable.

Para este estudio se seleccionaron las primeras tres combinaciones de parámetros que entregan los mayores band gaps relativos en cada modelo, con el fin de propagar incertidumbre sobre las propiedades físicas del material y evaluar el comportamiento que esta tiene sobre los band gaps.

4.2.2. Evaluación del comportamiento de band gaps en zonas de interés

Los modelos FEM empleados utilizan en su cálculo de diagrama de bandas un recorrido del vector de onda sobre el contorno de la IBZ de cada estructura (de ahora en adelante *recorrido predeterminado*, ver figura 4.12). Conforme a los objetivos de la investigación se implementó un nuevo recorrido del vector de onda, que incluye además el interior de la IBZ para así evaluar si los valores de los band gaps varían o no. Para esto se define el *recorrido propuesto* con un zig-zag ascendente sobre la IBZ tal como se observa en la figura 4.13.



Figura 4.12. Recorrido predeterminado del vector de onda sobre discretización espacial del contorno de la IBZ en plano x-y.



Figura 4.13. Recorrido propuesto de vector de onda sobre discretización espacial del contorno e interior de la IBZ en plano x-y.

Para esta evaluación se estudiaron los comportamientos sobre las primeras 10 combinaciones de parámetros que entregasen los mayores band gaps relativos para cada estructura.

4.2.3. Selección de zona de estudio útil

Teniendo los diagramas de banda calculados para ambos recorridos de vector de onda, corresponde escoger cuál de los dos es más práctico. Para esto se consideraron factores como gasto computacional y anchos de banda, evaluando la ubicación geométrica de los puntos mínimos y máximos que los caracterizan.

4.2.4. Modelamiento y propagación de la incertidumbre en las propiedades físicas sobre los band gaps

De acuerdo a lo establecido en 3.3, para propagar la incertidumbre sobre las propiedades físicas mediante la simulación de Monte Carlo, se necesita asignar una función de distribución de probabilidad a los parámetros que se quieren variar, en este caso densidad (ρ) y módulo de elasticidad (E). Para este estudio se escogieron distribuciones Gaussianas con los valores nominales (o medios) establecidos en 4.1.1.

Con el objetivo de caracterizar el comportamiento de los band gaps de forma más acabada, se seleccionaron varios valores para la desviación estándar, expresada como

$$\sigma_i = \alpha_i \cdot \mu \tag{4.6}$$

donde $\alpha = \{0.05, 0.1, 0.15, 0.2\}, \sigma$ la desviación estándar y μ el valor medio.

La selección del número de muestras se realizó mediante inspección tras evaluar el valor del *Coeficiente de variación* de la simulación de Monte Carlo, expresado como

$$cov_{MC} = \frac{1}{\sqrt{K}} \cdot \frac{\sigma}{\bar{X}} \tag{4.7}$$

donde \overline{X} y σ representan el promedio y la desviación estándar de la distribución simulada, respectivamente, con K el número de muestras. Este coeficiente indica el error sobre la estimación del valor medio y se estableció que debía ser menor o igual a un 1 %.

4.2.5. Evaluación del efecto de la incertidumbre sobre band gaps

Luego de haber llevado a cabo las tareas descritas fue posible desarrollar el análisis del efecto de propagar incertidumbre en las propiedades físicas del material, sobre el comportamiento de los band gaps, objetivo principal de este trabajo.

Capítulo 5

Resultados y discusión

5.1. Band gaps fonónicos

Se exponen a continuación algunos de los diagramas de bandas que presentan los mayores band gaps relativos. De aquí en adelante se asigna una jerarquía a cada band gap relativo con el fin de identificar cuáles son los mayores. Para esto se utilizan los adjetivos ordinales primer, segundo, tercer, etc. o números ordinales es su defecto: 1^{er} , 2° , 3^{er} , etc.

5.1.1. Recorrido predeterminado

5.1.1.1. Estructura con pirámide central



Figura 5.1. Diagramas de banda estructura con pirámide central. (a) Primer band gap relativo. (b) Segundo band gap relativo.



Figura 5.2. Diagrama de bandas para tercer band gap relativo en estructura con pirámide central.

Es posible notar que para el primer y tercer caso el band gap se sitúa entre la tercera y cuarta banda, no así para el segundo donde esto ocurre entre la cuarta y quinta.

A modo de resumen se presenta la siguiente tabla donde se observan para los tres primeros band gaps relativos, los puntos extremos de banda $(\max(\omega_n) \text{ y } \min(\omega_{n+1}))$, sus anchos, valor medio y los respectivos valores de band gap relativo.

Jerarquía	$\max(\omega_n)$	$\min(\omega_{n+1})$	$\Delta \omega$	ω_{media}	$\omega_{relativo}$
1^{er}	$6.37 \cdot 10^4$	$7.42 \cdot 10^4$	$1.05 \cdot 10^4$	$6.90 \cdot 10^4$	15.20%
$2^{\underline{o}}$	$5.59 \cdot 10^4$	$6.34 \cdot 10^4$	$7.55 \cdot 10^3$	$5.96 \cdot 10^4$	12.66%
3^{er}	$6.30 \cdot 10^4$	$7.13 \cdot 10^4$	$8.32 \cdot 10^{3}$	$6.72 \cdot 10^4$	12.38%

Tabla 5.1. Caracterización de band gaps en estructura con pirámide central.



Figura 5.3. Diagramas de banda estructura Kagome de base cuadrada. (a) Primer band gap relativo. (b) Segundo band gap relativo. (c) Tercer band gap relativo.

Para esta estructura en los primeros dos casos el band gap se localiza entre la quinta y sexta banda, no así para el tercero que ocurre entre las bandas cuarta y quinta. Para los tres casos la diferencia de band gap relativo es notable en comparación a la estructura con pirámide central tal como se evidencia en la siguiente tabla:

Jerarquía	$\max(\omega_n)$	$\min(\omega_{n+1})$	$\Delta \omega$	ω_{media}	$\omega_{relativo}$
1^{er}	$7.70 \cdot 10^4$	$8.11 \cdot 10^4$	$4.06 \cdot 10^{3}$	$7.90 \cdot 10^4$	5.14%
2 <u>°</u>	$5.98 \cdot 10^4$	$6.16 \cdot 10^4$	$1.72 \cdot 10^{3}$	$6.07 \cdot 10^4$	2.83%
3^{er}	$4.68 \cdot 10^4$	$4.79 \cdot 10^4$	$1.12 \cdot 10^3$	$4.74 \cdot 10^4$	2.36%

Tabla 5.2. Caracterización de band gaps en estructura Kagome de base cuadrada.

Es notable que para los seis casos recién presentados las bandas tienen el mismo valor en su punto inicial y final, esto porque el recorrido predeterminado del vector de onda es cerrado (ver figura 4.12).

5.1.2. Recorrido propuesto

Dado que para esta sección se estudiaron los primeros 10 band gaps relativos de cada recorrido sobre cada estructura, solo se incluyen gráficamente algunos de ellos por motivos prácticos. En específico se muestran únicamente los primeros band gaps relativos resultantes de la implementación del recorrido propuesto y algunos de los que presentaron una variación debido a esta.



Figura 5.4. Primer band gap relativo estructura con pirámide central. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos.



Figura 5.5. Primer band gap relativo estructura Kagome de base cuadrada. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos.

Tal como se observa en las figuras 5.4 y 5.5, los puntos extremos de banda coinciden con respecto a aquellos para los primeros band gaps relativos de las tablas 5.1 y 5.2, aunque en ellas se presentan con el segundo decimal aproximado.

A continuación se dispone el diagrama de bandas del tercer band gap relativo en la estructura de Kagome:



Figura 5.6. Tercer band gap relativo estructura Kagome de base cuadrada. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos.

de donde se desprende que el band gap relativo disminuye, dado que el máximo de la banda inferior $(4.78 \cdot 10^4 \text{ [Hz]})$ es mayor que el obtenido con el recorrido predeterminado (ver tabla 5.2). Por último es apreciable que los band gaps se sitúan entre las mismas bandas con respecto a la implementación de recorrido predeterminado.

A modo de resumen se muestran a continuación los valores de los band gaps relativos según estructura y recorrido de vector de onda:

	Band gap relativo%					
	Pirámi	de central	Kagome	de base cuadrada		
Jerarquía	Predet.	Propuesto	Predet.	Propuesto		
1^{er}	15.20	15.20	5.14	5.14		
2º	12.66	12.66	2.83	2.83		
3^{er}	12.38	12.38	2.36	0.29		
$4^{\mathbf{o}}$	11.89	11.89	2.34	2.34		
$5^{\underline{o}}$	11.44	11.44	2.15	2.15		
6 <u>0</u>	10.96	10.96	1.94	1.94		
7 <u>°</u>	10.73	10.73	1.92	0.20		
8º	10.59	10.59	1.86	1.86		
9 <u>0</u>	10.28	10.28	1.54	-		
$10^{\underline{o}}$	10.25	10.25	1.48	-		

Tabla 5.3. Primeros 10 band gaps relativos según estructura y recorrido de vector de onda.

Para la estructura con pirámide central los valores de los band gaps relativos son idénticos para ambos recorridos. Sin embargo, las cifras difieren para el tercer y séptimo band gap relativo en la estructura de Kagome. Para estos casos los resultados de la implementación del recorrido propuesto corresponden al 12.28% y 10.41% del band gap relativo con el recorrido predeterminado, respectivamente.

También es posible notar que los band gaps relativos noveno y décimo en la estructura de Kagome, no presentan band gap con la implementación del recorrido prupuesto. Esto significa que los máximos de la banda inferior son mayores que los mínimos de la banda superior, tal como se detalla a continuación:

Jerarquía	$\max(\omega_n)$	$\min(\omega_{n+1})$	$\Delta \omega$
9º	$4.83 \cdot 10^4$	$4.77 \cdot 10^4$	$-5.70 \cdot 10^2$
10 ^o	$4.74 \cdot 10^4$	$4.65 \cdot 10^4$	$-8.50 \cdot 10^2$

Tabla 5.4. Puntos extremos de diagramas de banda que no presentan band gap en estructura Kagome de base cuadrada.

Gráficamente para el primero de estos casos,



Figura 5.7. Diagrama de bandas sin band gap fonónico en estructura Kagome de base cuadrada. (a) Diagrama de bandas normal. (b) Diagrama de bandas con indicadores de puntos extremos.

De la misma manera que la sección anterior, es posible notar que para los diagramas de banda de esta sección cada banda tiene un punto inicial y final diferente, esto de acuerdo al recorrido propuesto del vector de onda que no es cerrado (ver figura 4.13).

Conforme a los objetivos de la investigación, se presentan los gráficos de burbuja que indican la cantidad y localización de puntos extremos de banda, para cada estructura, en la grilla del recorrido propuesto del vector de onda.



Figura 5.8. Cantidad y ubicación geométrica de puntos extremos de banda en grilla propuesta para estructura con pirámide central. (a) Máximos banda inferior. (b) Mínimos banda superior.



Figura 5.9. Cantidad y ubicación geométrica de puntos extremos de banda en grilla propuesta para estructura Kagome de base cuadrada. (a) Máximos banda inferior. (b) Mínimos banda superior.

Para la estructura con pirámide central los puntos extremos de banda se sitúan en su totalidad en el contorno de la IBZ, no así para la estructura de Kagome como se observa en la figura 5.9.a. Si bien el estudio de 10 muestras de un total de 20000 no es suficiente para establecer un patrón de comportamiento, los resultados obtenidos son aptos al menos para evidenciar el fenómeno de que los extremos de banda no necesariamente se sitúan en el contorno de la IBZ. Esta conducta fue estudiada en [14], donde se establece que independiente de la simetría de la celda, restringir el estudio de band gaps al contorno de la IBZ es suficiente para una etapa inicial de diseño, aunque no corresponde a una garantía de que el eventual band gap sea máximo o efectivamente sus puntos extremos se encuentren en esa zona.

Con tales resultados se tomó la decisión de propagar la incertidumbre con el recorrido predeterminado del vector de onda, ya que las diferencias entre un recorrido y otro se presentan exclusivamente en una estructura (Kagome) y solo en cuatro de sus 10 casos analizados. Además, este hecho pierde relevancia cuando se consideran únicamente los tres mayores band gap para llevar a cabo este proceso.

Por último, otro gran factor que determinó esta decisión corresponde al gasto computacional, dado que la grilla de recorrido propuesto tiene más del doble de puntos (55) en comparación con la del recorrido predeterminado (27), siendo este un factor sustancial para el estudio del problema.

5.2. Propagación de incertidumbre

Conforme a lo establecido en 4.2.1, la propagación de incertidumbre se realiza sobre los tres mayores band gaps relativos de cada estructura. Como se evidenció anteriormente, la implementación del recorrido propuesto para el vector de onda generó una diferencia considerable en el valor del tercer band gap relativo de la estructura de Kagome. Dicho esto la incertidumbre fue propagada sobre el primer, segundo y cuarto band gap relativo de esta estructura.

Cabe mencionar que todos los resultados dispuestos a continuación se obtuvieron mediante una simulación de Monte Carlo con 500 muestras y son expresados en función de los valores de ancho de banda ($\Delta \omega$) y frecuencia media de banda (ω_{media}). Además, todos los coeficientes de variación de la simulación fueron menor al criterio impuesto, obteniendo un valor máximo de 0.72 % aproximadamente.

5.2.1. Distribuciones simuladas

Se observan a continuación las distribuciones de probabilidad (en forma de histograma) obtenidas para el ancho de banda y frecuencia media considerando incertidumbre sobre las propiedades físicas del material. Estos resultados son generados a partir de los valores de desviación estándar establecidos en 4.2.4.

5.2.1.1. Estructura con pirámide central



Figura 5.10. Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$.



Figura 5.11. Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$.



Figura 5.12. Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$.



Figura 5.13. Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura con pirámide central. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$.

5.2.1.2. Estructura Kagome de base cuadrada



Figura 5.14. Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$.



Figura 5.15. Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$.



Figura 5.16. Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$.



Figura 5.17. Distribuciones de frecuencia media de banda simuladas por Monte Carlo para primer band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_3 = 0.15$. (b) $\alpha_4 = 0.2$.

A partir de los histogramas obtenidos es posible establecer que, independiente de la estructura y de la desviación estándar empleada en la simulación, las distribuciones obtenidas presentan el mismo comportamiento tanto en los anchos como en las frecuencias medias de banda. Esto se puede evidenciar al comparar las figuras 5.10.a y 5.12.a, o bien 5.15.a y 5.17.a, por ejemplo. De hecho, los coeficientes de variación de la simulación de Monte Carlo, para ancho y frecuencia media de banda, resultaron idénticos en cada estructura, desviación estándar y jerarquías de band gaps relativos estudiados.

Con el objetivo de estudiar el efecto de la incertidumbre de las propiedades físicas sobre los band gaps, se calcula para cada distribución simulada el *coeficiente de variación*, expresado como

$$CV = \frac{\sigma}{\bar{X}} \tag{5.1}$$

donde σ y \overline{X} tienen la misma interpretación establecida en 4.2.4. A continuación se observan los coeficientes de variación obtenidos (idénticos para ancho y frecuencia media de banda):

				$lpha_i$	
Estructura	Jerarquía	0.05	0.1	0.15	0.2
	1^{er}	3.6%	7.1%	10.9%	14.6%
Central	$2^{\underline{o}}$	3.6%	7.1%	10.9%	14.6%
	3^{er}	3.7%	6.7%	11.0%	15.2%
	1^{er}	7.2%	7.1%	12.2%	16.1%
Kagome	$2^{\underline{o}}$	3.6%	7.1%	10.6%	14.8%
	$4^{\mathbf{o}}$	7.3%	12.9%	11.8%	15.9%
	Promedio	4.8%	8.0%	11.2%	15.2%

Tabla 5.5. Coeficientes de variación de distribuciones simuladas según estructura, band gap relativo y desviación estándar.

Tal como se observa en la tabla 5.5, están demarcados con color rojo los coeficientes de variación que son mayores al promedio de cada columna asociada al factor α que caracteriza la desviación estándar.

Se puede notar que en las figuras 5.14.a, 5.15.a y 5.15.b, el comportamiento de la distribución es mas "puntiagudo" que el resto. Para estudiar el comportamiento asociado al valor del coeficiente de variación, se presentan a continuación el resto de los histogramas de las distribuciones simuladas para ancho de banda en la estructura de Kagome (se omiten los gráficos de frecuencia media de banda dado que poseen el mismo comportamiento).



Figura 5.18. Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para segundo band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$. (c) $\alpha_3 = 0.15$. (d) $\alpha_4 = 0.2$.



Figura 5.19. Distribuciones de ancho de banda simuladas por Monte Carlo para cuarto band gap relativo en estructura Kagome de base cuadrada. (a) $\alpha_1 = 0.05$. (b) $\alpha_2 = 0.1$. (c) $\alpha_3 = 0.15$. (d) $\alpha_4 = 0.2$.

En base a lo anterior es posible afirmar que las distribuciones que poseen un mayor coeficiente de variación son mas "puntiagudas", equivalente a decir que poseen alta kurtosis. Esto quiere decir que la variable de estudio (ancho de banda en este caso) está mas concentrada cerca del valor medio, o bien, que posee una baja desviación estándar.

Si bien el indicador del promedio de los coeficientes de variación no es representativo por sí solo, si fue efectivo para determinar qué distribuciones simuladas presentan el comportamiento recién descrito, es decir, sirvió como punto de comparación.

Por último conviene mencionar que este comportamiento se presentó solo en la estructura Kagome de base cuadrada, situación similar a aquella donde se presentó una variación en los band gaps al implementar los diferentes recorridos del vector de onda en ella.

5.2.2. Probabilidad de excedencia

Con el fin de caracterizar el comportamiento de los band gaps habiendo propagado incertidumbre sobre las propiedades físicas, se generan los gráficos de probabilidad de excedencia. En estos se presenta en el eje \boldsymbol{y} la probabilidad de que la variable de estudio (ancho y frecuencia media de banda) sea mayor que el valor dispuesto en el eje \boldsymbol{x} , denominado umbral.

Estos gráficos se generan a través de las distribuciones obtenidas por la simulación, tomando la cantidad de respuestas obtenidas sobre cierto umbral y dividiéndolas por el número total de muestras.

Dichos resultados tienen dos aplicaciones de alto potencial para una etapa de diseño de un metamaterial:

- 1. Teniendo una frecuencia media (o ancho de banda) objetivo de band gap para cierta aplicación, es posible conocer la probabilidad de obtener un valor mayor a este, bajo distintos escenarios de incertidumbre asociados a las desviaciones estándar empleadas en la simulación.
- 2. Teniendo una variable con valor objetivo, se puede conocer la probabilidad de que esta se sitúe en cierto rango. Supóngase que el umbral u_1 tiene un 90% de probabilidad de excedencia y el umbral u_2 un 10%. Con esto, la probabilidad de que la variable de diseño se encuentre en el rango de umbrales $[u_1, u_2]$ es de un 80%. También se puede interpretar como que la variable de diseño se va a situar en tal rango con un 80% de confiabilidad.

A continuación se muestran las probabilidades de excedencia de ancho y frecuencia media de banda para ambas estructuras y solo para los primeros band gap relativos (combinación de parámetros de diseño que entregan el mayor band gap), ya que ninguno de los otros gráficos presentó un comportamiento anómalo en comparación a los siguientes.



Figura 5.20. Probabilidad de excedencia en estructura con pirámide central según distintos valores de desviación estándar. (a) Probabilidad de excedencia ancho de banda. (b) Probabilidad de excedencia frecuencia media de banda.



Figura 5.21. Probabilidad de excedencia en estructura Kagome de base cuadrada según distintos valores de desviación estándar. (a) Probabilidad de excedencia ancho de banda. (b) Probabilidad de excedencia frecuencia media de banda.

Como se estableció con anterioridad, los comportamientos obtenidos para el ancho y frecuencia media de banda es idéntico independiente de la estructura, por eso las curvas de los gráficos de la figura 5.20 tienen el mismo comportamiento entre ellas, al igual que en la figura 5.21.

Aún cuando los gráficos no son comparables entre las distintas estructuras, es posible observar que la caída de las curvas de probabilidad de excedencia es más abrupta en la estructura de Kagome. Del mismo modo, para esta estructura se aprecia que hay un rango de ancho y frecuencia media de banda que es muy probable exceder. Este comportamiento se puede asociar a la menor dispersión que poseen las distribuciones simuladas dado que la mayoría de los datos se sitúa en un rango acotado de ancho y frecuencia media de banda, tal como se describió anteriormente.

Capítulo 6 Conclusiones

Habiendo recopilado todos los antecedentes y análisis realizados sobre los resultados expuestos, es posible afirmar que si bien el estudio se llevó a cabo sobre modelos computacionales de paneles tipo sándwich, el proceso de propagación de incertidumbre sobre las propiedades físicas y cómo esta afecta el comportamiento de los band gap, es un medio fundamental para acercar a estos materiales a su eventual realidad física. Es posible establecer esto porque precisamente se realizó la propagación con el objetivo de considerar los posibles efectos de los procesos de manufactura que se llevarían a cabo para su implementación.

Tal como se estableció, los resultados de probabilidad de excedencia para ancho y frecuencia media de banda presentan alto potencial en las aplicaciones mencionadas en 5.2.2. Si bien las frecuencias de excitación que se pueden presentar en las aplicaciones de las industrias de interés (aeronáutica, automovilística, deportiva y de mantenimiento) no suelen ser, ni probablemente existan del orden de aquellas a las cuales se presentan band gaps en estos paneles, si se encuentran dentro del rango de ondas de ultrasonido, siendo esta un área propuesta de estudio para la aplicación de estos metamateriales.

Cabe mencionar que los resultados asociados a la propagación de incertidumbre pueden ser más exactos si es que se aumenta el número de muestras por ejemplo. Asimismo, nunca se puede tener un 100% de certeza en que los resultados obtenidos son representativos de la realidad dado que se trabaja con procesos aleatorios y estadísticos, es por eso que en las eventuales aplicaciones se desea trabajar con rangos y confiabilidad de operación de acuerdo a los estándares del eventual usuario.

Dentro de lo más destacable se encuentra el comportamiento general de la estructura Kagome de base cuadrada. Comenzando por la diferencia que se presentó en los valores de los band gaps relativos (dada la implementación de los diferentes recorridos de vector de onda), como también la presencia de puntos extremos de banda en el interior de la IBZ, aunque esto valida información de la bibliografía consultada. Luego, los comportamientos poco dispersos obtenidos en las distribuciones simuladas mediante Monte Carlo.

Dado que el diseño de ambas estructuras empleadas no fue desarrollado por el estudiante a cargo de esta investigación, no es posible determinar las eventuales causas del comportamiento que difiere al resto en la estructura Kagome de base cuadrada. Tampoco es posible atribuir el comportamiento poco disperso a la propagación de incertidumbre como tal, pues el comportamiento del segundo band gap relativo (combinación de parámetros de diseño que entrega el segundo mayor band gap) de esta estructura sería el contraejemplo ya que presenta un comportamiento similar a los obtenidos para la estructura de pirámide central, es decir, más disperso en torno a la media.

Dicho todo lo anterior es posible afirmar que los objetivos de la investigación se cumplieron a cabalidad. Se llevaron a cabo todos los procesos propuestos para evaluar el efecto de la incertidumbre en las propiedades físicas sobre el comportamiento de los band gaps.

Por último cabe destacar que el nivel de desarrollo de esta área de investigación es aún incipiente, por tanto el presente estudio conforma parte de una etapa inicial asociada al estudio de band gaps en materiales tipo sándwich, sobre todo porque fue un estudio computacional sobre solo dos estructuras con diferentes parámetros de diseño. No obstante, es parte fundamental dentro de la construcción del conocimiento del área.

Bibliografía

- Bostrom, N., "Technological revolutions: Ethics and policy in the dark," en Nanoscale: Issues and Perspectives for the Nano Century (Cameron, N. y Mitchell, M. E., eds.), pp. 129–152, John Wiley & Sons, Inc., 2007.
- [2] Quinteros, L., Meruane, V., y Cardoso, E. L., "Phononic band gap optimization in trusslike cellular structures using smooth p-norm approximations," Structural and Multidisciplinary Optimization, vol. 64, pp. 113–124, 2021.
- [3] Schaedler, T. y Carter, W., "Architected cellular materials," Annual Review of Materials Research, vol. 46, pp. 187–210, 2016.
- [4] Deymier, P. A., Acoustic Metamaterials and Phononic Crystals, vol. 173 de Springer Series in Solid-State Sciences. Springer Berlin, Heidelberg, 1 ed.
- [5] Singh, G. y Marwaha, A., "A review of metamaterials and its applications," International Journal of Engineering Trends and Technology, vol. 19, no. 6, pp. 305–310, 2015.
- [6] Valdevit, L., Bertoldi, K., Guest, J., y Spadaccini, C., "Architected materials: Synthesis, characterization, modeling, and optimal design," Journal of Materials Research, vol. 33, no. 3, pp. 241–246, 2018.
- [7] D'Alessandro, V., Petrone, G., Franco, F., y Rosa, S. D., "A review of the vibroacoustics of sandwich panels: Models and experiments," Journal of Sandwich Structures and Materials, vol. 15, pp. 541–582, 2013.
- [8] Spadoni, A., Ruzzene, M., Gonella, S., y Scarpa, F., "Phononic properties of hexagonal chiral lattices," Wave Motion, vol. 46, no. 7, pp. 435–450, 2009.
- [9] Qian, W. y Zhang, C., "Review of the phonon calculations for energetic crystals and their applications," Energetic Materials Frontiers, vol. 2, pp. 154–164, 2021.
- [10] Brillouin, L., Wave Propagation in Periodic Structures. International Series in Pure and Applied Physics, McGraw-Hill Book Company, Inc., 1 ed., 1946.
- [11] Sigmund, O. y Jensen, J. S., "Systematic design of phononic band-gap materials and structures by topology optimization," Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences., vol. 361, pp. 1001–1019, 2003.
- [12] Robert, C. P. y Casella, G., Monte Carlo Statistical Methods. Springer Texts in Statistics, Springer New York, NY, 2 ed., 2004.
- [13] Gálvez, V., "Desarrollo de modelos en elementos finitos parametrizados de paneles tipo sandwich con nucleos ultralivianos para predecir band gaps," 2021. Santiago, Chile.
- [14] Maurin, F., Claeys, C., Deckers, E., y Desmet, W., "Probability that a band-gap extremum is located on the irreducible brillouin-zone contour for the 17 different plane crysta-

llographic lattices," International Journal of Solids and Structures, vol. 135, pp. 26–36, 2018.