



UNIVERSIDAD DE CHILE
FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS Y MATEMÁTICAS
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA MECÁNICA

OPTIMIZACIÓN TOPOLOGICA DE UN PANEL DE METAMATERIAL PARA LA
SUPRESIÓN DE VIBRACIONES A TRAVÉS DE UN METAMODELO GENERADO
POR KRIGING

MEMORIA PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO CIVIL MECÁNICO

SEBASTIÁN ANDRÉS ASTUDILLO FARÍAS

PROFESORA GUÍA:
VIVIANA MERUANE NARANJO

MIEMBROS DE LA COMISIÓN:
RAFAEL RUIZ GARCÍA
ALI AKBARIFAKHRABADI

Este trabajo ha sido parcialmente financiado por:
Núcleo Milenio Materiales Mecánicos Suaves e Inteligentes

SANTIAGO DE CHILE
2021

RESUMEN DE LA MEMORIA PARA OPTAR
AL TÍTULO DE INGENIERO CIVIL MECÁNICO
POR: SEBASTIÁN ANDRÉS ASTUDILLO FARÍAS
FECHA: 2021
PROF. GUÍA: VIVIANA MERUANE NARANJO

OPTIMIZACIÓN TOPOLOGICA DE UN PANEL DE METAMATERIAL PARA LA
SUPRESIÓN DE VIBRACIONES A TRAVÉS DE UN METAMODELO GENERADO
POR KRIGING

Los metamateriales exhiben propiedades excepcionales que no se encuentran de forma natural en materiales corrientes, propiedades que derivan principalmente de su geometría estructural y no de su composición material. En este trabajo se realiza un análisis exploratorio sobre una estructura tipo voladizo-en-masa, para el diseño de un metamaterial capaz de suprimir vibraciones en un amplio rango de frecuencias, a partir de las resonancias locales que generan los voladizos en el interior de su estructura. Para esto, se propone el diseño de una celda bidimensional conformada por una matriz cuadrada de vigas, sobre la cual se empotran elementos en voladizo. Se lleva a efecto una optimización topológica de la celda con el objetivo de encontrar aquellas variables de diseño que maximicen la amplitud de una banda de frecuencias en donde se produzca una disminución considerable de la respuesta de vibratoria. Con este objetivo, se aplica un algoritmo de optimización basado en modelos sustitutivos o metamodelos, los cuales permiten reemplazar la función objetivo del problema por una función estimada que es obtenida a través de procesos Gaussianos. Para modelar la estructura, la celda es discretizada mediante elementos finitos tipo viga, usando la teoría de Euler-Bernoulli. Por otro lado, en virtud del Teorema de Bloch se exploran los diagramas de dispersión de la onda sobre la celda en un sistema periódico infinito y, a partir de ellos, se identifican band gaps fonónicos, es decir, rangos de frecuencia en donde las vibraciones no pueden ser propagadas. Los resultados obtenidos muestran que existe una relación directa entre las frecuencias de resonancia características de los voladizos de la estructura y la aparición de band gaps fonónicos. La presencia de band gaps fonónicos es verificada sobre un panel finito conformado por la unión de repeticiones de la celda, sobre la que se demuestra que los modos locales generan la aparición de antiresonancias en la función de respuesta en frecuencias, confirmando así la participación de modos locales en la formación de band gaps fonónicos.

*A mi familia y amigos,
en especial a mis padres, abuelos y a todos quienes me han dado su apoyo.*

Agradecimientos

Me gustaría comenzar agradeciendo a mi familia, por entregarme ánimo, apoyo y contención a lo largo de todo este proceso que parecía inacabable, a mis hermanos Diego, Vicente y Ale por los ratos de entretenimiento en casa y por dejarme molestarlos, a mi mamá y papá que siempre estuvieron presentes en los momentos buenos y sobre todo en los malos aguantando mi mal humor y consintiéndome, a mis tatas por mimarme cuando me veían cansado y aprovecharme de eso varias veces, también a Javi que aunque en el último tiempo no nos vimos mucho siempre me apoya en todo, y en general a toda mi familia porque siempre me estuvieron alentando a continuar con mis estudios y sé que disfrutaban de mis logros.

También quiero agradecer a mis amigos y a todos esos lazos de amistad que se fueron formando en el camino, que aparecían justo cuando más los necesitaba. Con ustedes la experiencia universitaria cambió completamente y estoy seguro que mi mayor ganancia son todos esos recuerdos compartiendo, incluso cuando nos quedábamos hasta tarde en la U estudiando. Quiero mencionar en especial a Dani, Mati, Alfredo, Juanmi y Maxi que me acompañaron a lo largo de toda la especialidad; al Suelto, el Corrales y Coni que son personas increíbles y tenemos demasiadas anécdotas juntos; a toda la gente maravillosa del cuarto; a Giamnfranko y a Daniel Mardini por su infinita ayuda y consejos, sobre todo en este último trabajo, por apañarnos mutuamente, por la confianza y por compartir esos proyectos que ojalá algún día concretemos; también a Nico que fuera de la U siempre ha estado animándome y entregándome todo su apoyo y con quién tengo un nivel de confianza y afecto increíble, también agradezco a su familia que me ha recibido con los brazos abiertos varias veces en su casa y por ser tan atentos conmigo.

Finalmente quiero agradecer a la comisión de este trabajo, a la Profesora Viviana Meruane por haber confiado en mí y darme la oportunidad de participar en este trabajo, por atender cada una de las dudas que tenía y por ser una excelente docente; al Profesor Rafael Ruíz por sus consejos y ofrecerme toda su ayuda; y al Profesor Ali Akbari por su contribución en este trabajo.

Tabla de Contenido

Introducción	1
1 Antecedentes	4
1.1 Metamateriales	4
1.2 Cristales Fonónicos	4
1.2.1 Band Gaps Fonónicos	6
1.2.2 Estructuras Celulares Periódicas	7
1.3 Cristales Ideales	8
1.3.1 Red Recíproca	10
1.3.2 Zona Irreductible de Brillouin	12
1.4 Mecanismos de Propagación de una Onda Elástica	13
1.4.1 Función de Onda Plana	14
1.4.2 Relación de Dispersión	16
1.4.3 Teorema de Bloch	16
1.4.4 Propagación de Ondas Elásticas en Cristales Fonónicos	18
1.4.5 Sistemas Discretos y Estructuras Celulares	18
1.5 Estructura de Bandas de Frecuencias	22
1.6 Análisis Modal de Estructuras Periódicas	24
1.6.1 Función de Respuesta en Frecuencias	26
1.7 Resonancias Locales en Cristales Fonónicos	27
1.8 Elementos Finitos	29
1.8.1 Métodos Matriciales	30
1.9 Optimización Topológica	33
1.9.1 Declaración del Problema de Optimización	34
1.10 Aplicación de Metamodelos	34
1.10.1 Modelamiento por Kriging	35
1.10.2 Búsqueda de óptimos en Metamodelos (Searching Surrogate Models)	38
2 Formulación	39
2.1 Geometría de la Celda Unitaria	39
2.2 Imposición de Simetría	40
2.3 Dominio de Diseño	41
2.4 Modelo de Elementos Lineales	41
2.5 Imposición de Periodicidad	42
2.6 Formulación del problema de Optimización	42
3 Metodología	44
3.1 Generación de Muestras y Simulación	44
3.2 Construcción del Metamodelo de Kriging	46
3.3 Validación	46
4 Resultados	48
4.1 Refinamiento de Malla	48
4.2 Optimización del Dominio de Diseño	51
4.2.1 Muestra de Datos Experimentales	51
4.2.2 Entrenamiento del Metamodelo de Kriging	52

4.2.3	Celda Unitaria Optimizada	54
4.3	Análisis Modal	55
4.3.1	Modos característicos de la viga en voladizo	57
4.3.2	Panel Finito	58
5	Discusión y Análisis	61
5.1	Análisis de Refinamiento de Malla	61
5.2	Análisis de Metamodelos	61
5.3	Análisis de Optimización mediante Metamodelos	62
5.4	Celda Unitaria Óptima	62
5.5	Análisis Modal	63
5.6	Análisis sobre Paneles Finitos	63
6	Conclusión	65
6.1	Trabajos Futuros	65
	Bibliografía	66
	Anexos	69

Índice de Tablas

1	Propiedades mecánicas del Aluminio 6061 y Tungsteno.	41
2	Parámetros de diseño evaluados sobre la celda unitaria.	48
3	Desempeño del modelo de elementos finitos empleando refinamiento distintos.	51
4	Índice de aciertos (IoA) de modelos de Kriging con diferentes funciones de regresión y correlación.	52
5	Predicción del modelo de Kriging en cada iteración.	54
6	Parámetros de la celda unitaria optimizada.	55
7	Band gap observado sobre la celda periódica optimizada	55
8	Frecuencia local de resonancia y frecuencias naturales de los primeros modos de dispersión sobre Γ , M y M	57
9	Primeras frecuencias naturales de elemento en voladizo.	57

Índice de Ilustraciones

1	Modelo de diseño de la estructura periódica con resonadores integrados. . . .	2
2	Cristal fonónico con periodicidad en diferentes dimensiones [1]	5
3	Arreglo de cilindros de acero en una placa rígida de acero perforada periódicamente [2].	6
4	Diagrama de bandas de un cristal fonónico [2].	7
5	Espectro de transmisión a través del arreglo de cilindros en agua. El recuadro muestra la sección transversal del cristal fonónico [2].	7
6	Muestras de estructuras celulares de diferentes topologías.	8
7	Estructura cristalina para un arreglo bidimensional.	9
8	Redes de Bravais bidimensionales.	10
9	Construcción de algunos puntos de la red recíproca a partir de la red directa [3].	11
10	Celdas unitarias cuadrada y hexagonal representadas en (a) red real; (b) red recíproca [1].	12
11	Primeras zonas de Brillouin en planos bidimensionales.	12
12	Zona irreductible de Brillouin de celdas unitarias cuadradas y hexagonales en el espacio recíproco [4].	13
13	Propagación de ondas longitudinales y transversales en un sólido cristalino de dos dimensiones. Las ondas se propagan horizontalmente con el vector de onda \mathbf{k}	14
14	Cristal fonónico unidimensional e infinito. La estructura periódica alterna capas de dos materiales sólidos de propiedades constitutivas distintas [1]. . . .	18
15	Estructura celular tipo panal triangular: (a) representación de la estructura; (b) representación en la red directa y red recíproca, señalando la zona irreductible de Brillouin [4].	19
16	Representación de una celda unitaria 2-D discretizada, agrupando las ubicaciones de sus grados de libertad [5].	21
17	Estructura de bandas en cristales bidimensionales [6].	23
18	Representación de sistemas con múltiples grados de libertad [7] [8].	25
19	Función de respuesta en frecuencias de un sistema de dos masas y resortes con amortiguamiento [7].	27
20	Cristal fonónico 2-D con resonadores internos [6]: (a) Composición de la celda unitaria; (b) Representación idealizada del sistema.	28
21	Equivalencia entre celdas unitarias tipo masa en masa y celdas voladizo en masa [9]	29
22	Viga de metamaterial con resonadores en forma de voladizos [9]: (a) Geometría de la celda unitaria; (b) Simulación de elementos finitos del modelo voladizo en masa durante la propagación de ondas.	29
23	Familias de elementos finitos [7].	30
24	Elemento viga 2-D de Euler-Bernoulli.	31
25	Unión rígida de dos vigas en 90° [10].	33
26	Esquematación de las tres categorías de optimización estructural [11]: (a) Optimización de tamaño; (b) Optimización de forma; (c) Optimización topológica.	33
27	Modelo de Kriging para estimar la superficie de respuesta [12].	35

28	Función de correlación exponencial generalizada evaluada con diferentes hiperparámetros [13].	37
29	Estructura parametrizada de la celda unitaria.	40
30	Simetrías internas de la celda.	40
31	Elemento viga en voladizo	42
32	Diagrama de flujo para la etapa de generación de muestras y simulación. . .	45
33	Diagrama de flujo para la metodología de optimización.	47
34	Modelo de celda unitaria.	49
34	Diagrama de bandas obtenido a través de distintos refinamientos de malla. .	50
35	Band gap sobre la banda $n = 8$. Acercamiento sobre malla (b).	50
36	Modelo de elementos finitos de la celda unitaria de estudio genérica.	51
37	Estabilización del modelo de Kriging para para la estimación del band gap óptimo.	52
38	Variograma experimental de modelos de Kriging con distintas funciones de regresión y correlación.	53
39	Diagrama de bandas de la celda unitaria optimizada.	54
40	Primeros modos obtenidos para un vector de onda situado en el punto Γ del espacio- k	55
41	Primeros modos obtenidos para un vector de onda situado en el punto \mathbf{X} del espacio- k	56
42	Primeros modos obtenidos para un vector de onda situado en el punto \mathbf{M} del espacio- k	56
43	Frecuencia de resonancia local indicada en el diagrama de bandas.	56
44	Modos locales de vibración.	57
45	Primeros modos obtenidos de un elemento en voladizo.	57
46	Ensamble 5 x 5 de la celda unitaria optimizada con apoyo simple en las esquinas y una excitación armónica unitaria en el medio del borde izquierdo.	58
47	Función de respuesta en frecuencias en la dirección $\Gamma \rightarrow \mathbf{X}$ de distintos ensamblajes. La leyenda u , v y θ indica respectivamente el desplazamiento horizontal, vertical y angular.	59
48	Función de respuesta en frecuencias en la dirección $\Gamma \rightarrow \mathbf{M}$ de distintos ensamblajes. La leyenda u , v y θ indica respectivamente el desplazamiento horizontal, vertical y angular.	60
49	Funciones básicas de correlación de Kriging	69

Introducción

Antecedentes Generales

Los metamateriales son una novedosa clase de materiales artificiales que exhiben comportamientos excepcionales que no se manifiestan naturalmente en materiales corrientes. Contrario al pensamiento intuitivo, las propiedades que los metamateriales desarrollan, provienen de su estructura diseñada y difieren de las del material empleado en su composición. Este concepto permite a los ingenieros pensar fuera de las restricciones impuestas por los materiales convencionales y desarrollar nuevas tecnologías.

Inicialmente, los metamateriales comenzaron a ser estudiados durante el tratamiento de ondas electromagnéticas. Los resultados experimentales mostraron que sobre estructuras compuestas por unidades periódicas, es posible inhibir la propagación de ondas electromagnéticas. De forma análoga, la propagación de ondas mecánicas a través de un medio periódico exhibe band gaps fonónicos, que corresponden a rangos de frecuencia donde una vibración es incapaz de transmitirse. Este fenómeno proviene de la contribución de cada unidad periódica que conforma al metamaterial, al igual que las propiedades de un material corriente son consecuencia de su estructura atómica a nivel microscópico. Con esta idea en mente, se denominan cristales fónicos a aquellas estructuras que cuentan con una geometría periódica, con la cual es posible manipular las vibraciones mecánicas.

La optimización topológica de cristales fonónicos fue introducida por Sigmund & Jensen [14], quienes desarrollan esta técnica como un proceso de discretización de la celda periódica en múltiples elementos, cuyas propiedades, como la densidad y rigidez, son tratadas como variables de diseño, que a través de una función objetivo y restricciones adecuadas, pueden ser ajustadas para amplificar el rango de frecuencias de supresión de vibraciones.

Motivación

Los cristales fonónicos destacan por ser estructuras que previenen la propagación de ondas en rangos específicos de frecuencias, característica que puede ser explotada en distintos campos. Es posible, por ejemplo, minimizar la respuesta vibratoria sobre los bordes de un panel, convirtiéndolo en un filtro de frecuencias útil para aisladores acústicos y protectores de vibraciones. Por otro lado, es posible maximizar la respuesta de una área específica de la estructura, evitando que la vibración se propague hacia otras zonas, lo que se conoce como guías de frecuencia. Una manera efectiva de diseñar estos materiales es añadir resonadores de masas en su interior, provocando que la energía de las vibraciones sea contrarrestada a través de resonancias locales de la estructura.

La motivación principal de este trabajo es explorar la capacidad que tienen los materiales periódicos que incorporan resonadores internos de masa, para desarrollar bandas de supresión de vibraciones, ya que a través de éstos se podría concebir un modelo ajustable para respon-

der a rangos de vibración deseados, realizando modificaciones sobre la rigidez o la masa del resonador.

Para estudiar la influencia de resonadores en el comportamiento vibratorio de un cristal fonónico, se propone el modelo de estructura periódica representada en la figura 1, el cual consiste de una matriz de vigas sobre la cuál se añaden elementos en voladizo.

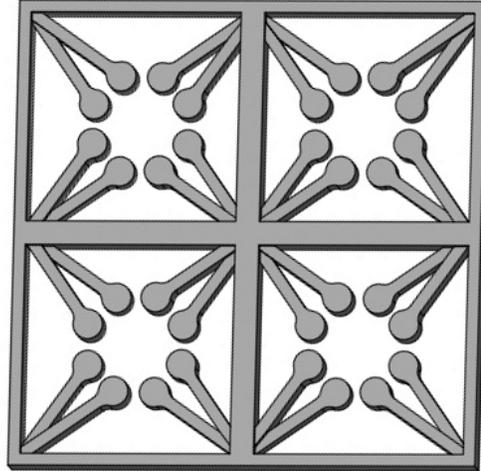


Figura 1: Modelo de diseño de la estructura periódica con resonadores integrados.

Objetivos

Objetivos Generales

Diseñar y optimizar un panel bidimensional de metamaterial conformado por una estructura periódica dotada de resonadores locales, con el fin de suprimir vibraciones en un amplio rango de frecuencias

Objetivos Específicos

- Determinar la estructura de bandas de frecuencias del modelo de celda unitaria.
- Analizar los modos de vibración de la estructura y sus modos locales de resonancia.
- Formular la función objetivo y definir el dominio de diseño del problema de optimización topológica.
- Generar y refinar un modelo predictivo de la respuesta vibratoria de la estructura mediante modelos de Kriging,
- Validar el diseño de celda periodica sobre un panel finito bidimensional.

Alcances

El presente trabajo comprende el modelamiento numérico y la simulación de la estructura idealizada que se muestra en la figura 1. Además se incluye una revisión teórica de los

mecanismos de propagación de ondas al interior de estructuras con geometrías periódicas. Por otro lado, la resolución del problema de maximización del band gap está basado en la optimización mediante modelos sustitutos (Searching Surrogate Models [15]), por lo tanto, la implementación de otros métodos de optimización topológica no serán abordados en el estudio.

1. Antecedentes

1.1. Metamateriales

Los metamateriales corresponden a una novedosa categoría de materiales compuestos (no homogéneos), que se obtienen artificialmente a través de una arquitectura arbitraria que es diseñada de forma inteligente. De este modo, las propiedades que el metamaterial manifiesta provienen directamente de la posición y la geometría que ocupan sus componentes dentro de la estructura, que por lo general consiste en una matriz primaria con inclusiones de un material secundario. A diferencia de los materiales compuestos comunes, en los metamateriales las inserciones de las segundas fases ocupan posiciones estratégicas, definiendo patrones que se repiten de forma periódica. Con esto, es posible obtener propiedades globales que difieren completamente de las propiedades propias de cada componente [16].

A través de la geometría de un metamaterial es posible controlar las interacciones con ondas electromagnéticas o mecánicas, junto con la anisotropía y la densidad del material, logrando propiedades excepcionales y de interés para el desarrollo de nuevas tecnologías [17]. Un ejemplo ampliamente reconocido corresponde al uso de las interacciones entre resonadores ópticos y ondas electromagnéticas, para diseñar metamateriales con permeabilidad magnética y permitividad eléctrica negativas y, en consecuencia, generar una superficie con índices de refracción negativa [18].

En particular, las estructuras que son diseñadas para responder a la radiación electromagnética se denominan metamateriales electromagnéticos, metamateriales ópticos o cristales fotónicos. De forma análoga, las estructuras que interactúan con ondas mecánicas se denominan metamateriales elásticos, metamateriales acústicos o cristales fonónicos.

1.2. Cristales Fonónicos

Los cristales fonónicos son metamateriales dotados de una arquitectura periódica, la cual impide las propagaciones de ondas acústicas o elásticas en ciertos regímenes de vibración (determinados por la dirección de propagación y frecuencia de la onda). El concepto teórico de los cristales fonónicos fue abordado por primera vez hace dos décadas, a través de una comparativa con los cristales fotónicos [19], y a partir de ese momento se han estudiado en profundidad factores como el tipo de material constituyente, el tamaño y el espaciado, que determinan el comportamiento de las ondas mecánicas a través de estas estructuras.

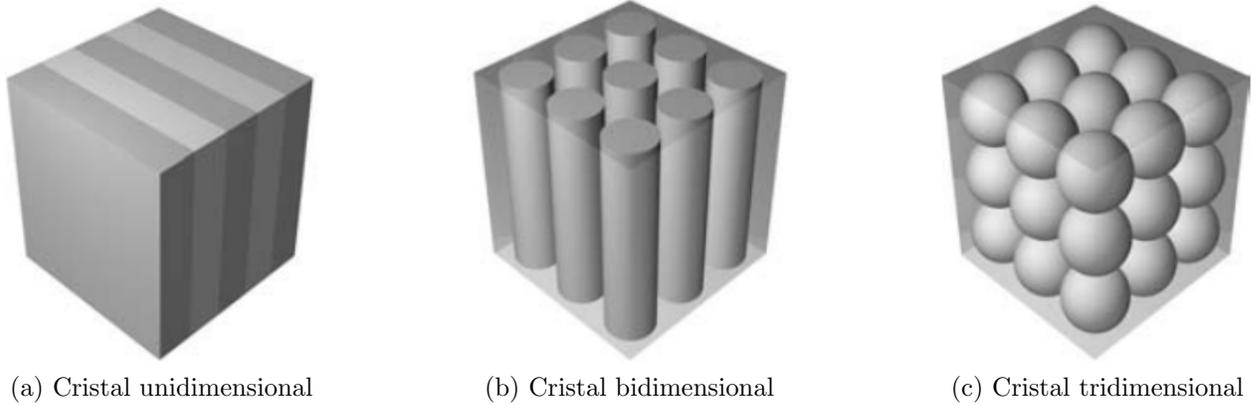


Figura 2: Cristal fonónico con periodicidad en diferentes dimensiones [1]

La periodicidad de la estructura puede ser desde una hasta las tres dimensiones del espacio, como se muestra en la figura 2. Por otro lado, las escalas de tamaño cubren ordenes de magnitud desde nanómetros hasta metros. Además, los cristales fonónicos suelen estar hechos de una combinación de materiales (fases) sólido-sólido o sólido-fluido. Así, desde el punto de vista del tipo de onda, los cristales fonónicos pueden ser acústicos con una matriz fluida; o elásticos con una matriz sólida elástica. Los mecanismos de propagación de onda dependen del tipo de material en donde se transmite la energía, de modo que en el primer grupo corresponde a ondas de presión que viajan a través de un fluido (por ejemplo aire), y en el segundo, a distorsiones elásticas a través de un cuerpo sólido (por ejemplo deformaciones sobre una viga).

Al modelar a los cristales fonónicos como una red periódica infinita, es posible determinar bandas de frecuencias en donde no se transmiten ondas mecánicas, denominados band gaps fonónicos. Es por este motivo que las principales aplicaciones de los cristales fonónicos están ligadas a la aislación acústica y la supresión de vibraciones. Teóricamente, una onda elástica, cuya frecuencia se encuentra dentro de un band gap fonónico, será completamente reflejada por la estructura; de lo cual se desprende la posibilidad de construir espejos no absorbentes de ondas elásticas y cavidades libres de vibraciones que podrían ser útiles en sistemas mecánicos de alta precisión, como guías y filtros de frecuencias [20].

Un ejemplo típico de estos sistemas consiste de un conjunto de cilindros paralelos idénticos sumergidos en agua, para los que se comprueba la presencia de band gaps fonónicos [2]. En el estudio citado se consideraron ondas propagándose en la dirección normal a los cilindros, reduciendo así el problema a dos dimensiones (figura 3).

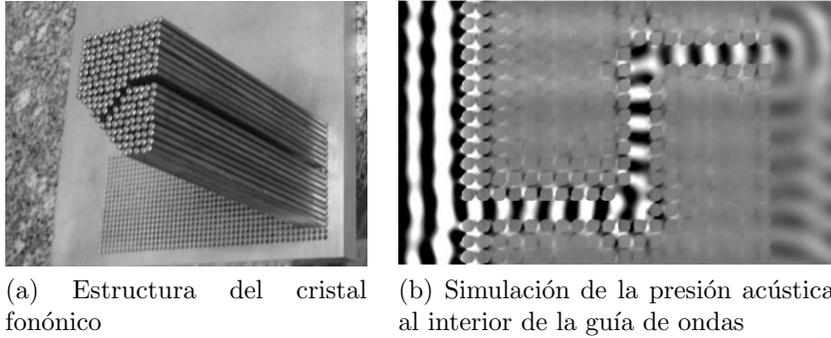


Figura 3: Arreglo de cilindros de acero en una placa rígida de acero perforada periódicamente [2].

1.2.1. Band Gaps Fonónicos

La inserción de segundas fases produce la dispersión y la reflexión de la onda, ya sea acústica o elástica, al interior del material primario, de modo que en la interfase de la estructura se producirán interferencias, que en algunos casos podrían ser destructivas. Las interferencias son favorecidas a través de la periodicidad de la red del cristal fonónico, permitiendo que en ciertas direcciones existan rangos de frecuencias para las cuales una onda es capaz de propagarse (banda de paso), mientras que en otros rangos no será posible debido a interferencias destructivas (banda de detención) [4]. De manera particular, se denomina band gap completo o band gap fonónico, si existe un rango de frecuencias en donde la onda es incapaz de propagarse en cualquiera de las direcciones. Esta propiedad se puede identificar a través de diagramas de banda, que representan gráficamente las superficies de dispersión de la onda en cristales fonónicos infinitos. En la figura 4 se muestra el diagrama de bandas calculado para el arreglo de cilindros de la figura 3, para el cual se identifica la presencia de un band gap del orden de $100[Hz]$. El eje de las abscisas representa las direcciones de propagación de onda y el eje de las ordenadas las frecuencias con la que una onda se propagaría en esa dirección. De esta forma, una vibración con una frecuencia que se encuentre dentro del band gap, no cuenta con direcciones admisibles para propagarse.

En la práctica, los cristales fonónicos son estructuras finitas, por lo que se debe examinar la transmisibilidad de las vibraciones. En la figura 5 se presenta el espectro de transmisión de energía entre dos puntos del arreglo de barras de acero (figura 3), donde se comprueba que en el rango comprendido por el band gap se produce una supresión de vibraciones.

El ancho en frecuencias del band gap se puede modificar variando la periodicidad y la proporción de las fases en la estructura, y utilizando materiales con constantes elásticas dispares. Por esta razón, un enfoque actual de estudio consiste en la aplicación de técnicas de optimización topológica como proceso de diseño de estructuras periódicas que generen band gaps en rangos deseados de frecuencia y que maximicen la supresión de vibraciones.

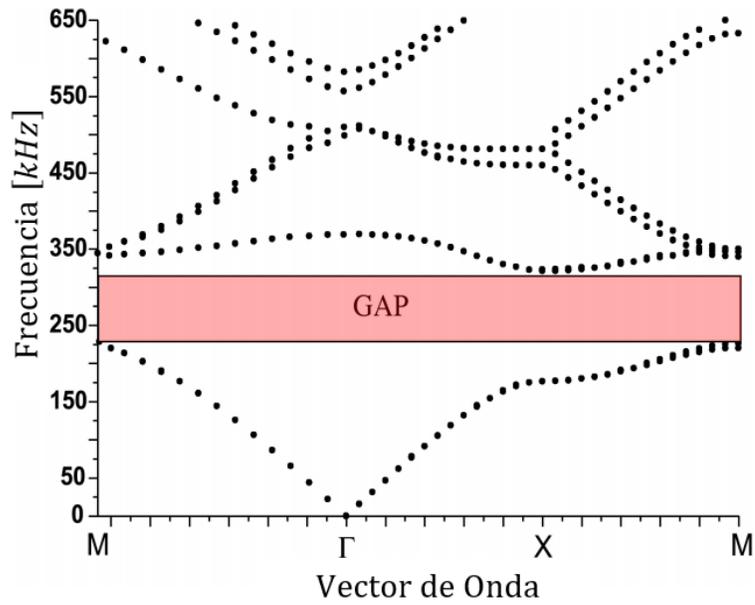


Figura 4: Diagrama de bandas de un cristal fonónico [2].

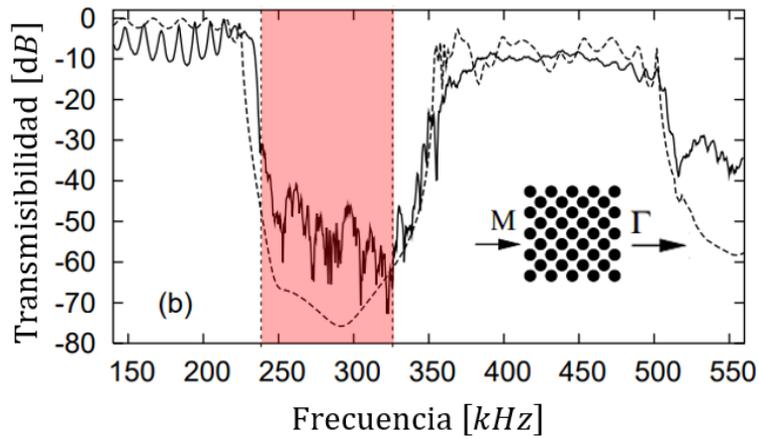
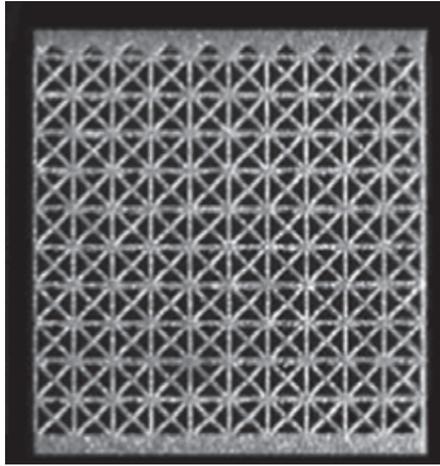


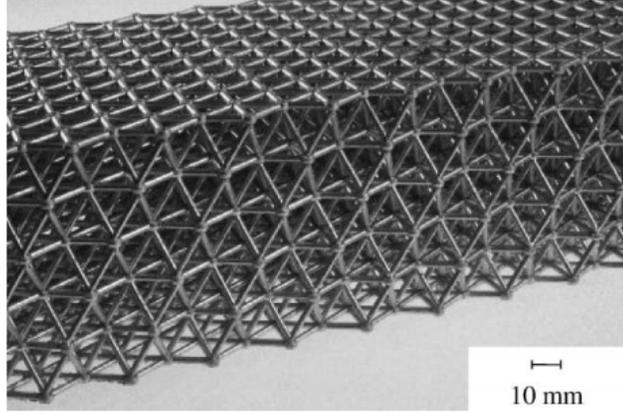
Figura 5: Espectro de transmisión a través del arreglo de cilindros en agua. El recuadro muestra la sección transversal del cristal fonónico [2].

1.2.2. Estructuras Celulares Periódicas

Las estructuras celulares periódicas son aquellas que se obtienen del teselado de una celda unitaria que está formada por un arreglo de vigas o barras [21], con una configuración de celda de dos dimensiones (figura 6a) o tres dimensiones (figura 6b). Gracias a estas estructuras es posible obtener una alta resistencia y rigidez específicas, una densidad relativa baja, control de la transferencia de calor y una mayor absorción de energía mecánica [22], motivo por el que son usadas en metamateriales.



(a) Celda cuadrada 2D [23]



(b) Celda 3D con estructura de octeto [24]

Figura 6: Muestras de estructuras celulares de diferentes topologías.

El desempeño y las propiedades de las estructuras celulares dependen de factores como la topología de las celdas; número de celdas; cantidad de ligaduras (uniones de elementos); parámetros geométricos, incluido el espesor de los elementos y el tamaño de la celda; características del material propio de la estructura y del proceso de fabricación; así como las condiciones de borde y de carga [23]. Es por esta razón que el ajuste de la topología y el tamaño de la celda permiten manipular las propiedades características del material celular para lograr los requisitos de aplicación deseados.

Además de las propiedades efectivas mencionadas, se ha demostrado que en celdas periódicas bidimensionales cuadradas y en geometrías de panales (honeycomb) triangulares y hexagonales se observan band gaps fonónicos completos [21]. Es por ello que una de las posibles aplicaciones ingenieriles de estas estructuras es la composición de paneles para la aislación del sonido y la supresión de vibraciones [25].

1.3. Cristales Ideales

Los cristales ideales se construyen repitiendo la misma unidad estructural o motivo, infinitamente en el espacio. La estructura de cualquier cristal puede describirse en términos de una red cristalina conformada por puntos de red y vectores red. Es este concepto el que da nombre a los cristales fonónicos.

Una red cristalina es un arreglo periódico y regular de puntos discretos (puntos de red o nodos) en el espacio. Para el caso bidimensional, se define a través de dos vectores que deben satisfacer la condición de que para cualquier posición \mathbf{r} del cristal, la distribución de puntos es exactamente la misma que cuando es observada desde otro punto $\tilde{\mathbf{r}}$. Esta propiedad se enuncia matemáticamente como:

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r} + a\mathbf{x}_1 + b\mathbf{x}_2 \quad (1.1)$$

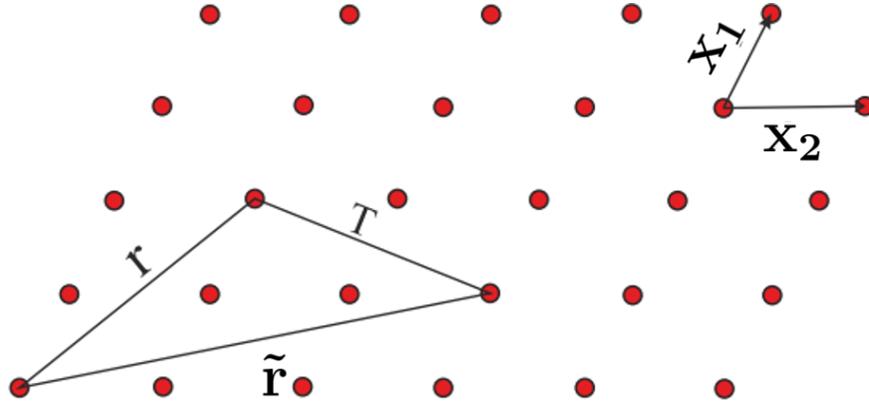


Figura 7: Estructura cristalina para un arreglo bidimensional.

Donde \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 son los vectores de red, y a y b son ponderadores enteros en el intervalo $]-\infty, +\infty[$. Las operaciones de traslación sobre un cristal se realizan desplazándolo por una cantidad \mathbf{T} , tal como se muestra en la figura 7, de modo que se cumpla lo siguiente:

$$\mathbf{T} = a\mathbf{x}_1 + b\mathbf{x}_2 \quad (1.2)$$

Donde \mathbf{T} es el vector desplazamiento entre los puntos final ($\tilde{\mathbf{r}}$) e inicial (\mathbf{r}). Los vectores de red también se denominan vectores de traslación primitivos, ya que el espacio definido entre ellos corresponde a la mínima área posible de una celda que puede usarse como patrón básico de la estructura completa. Por lo tanto, la magnitud de los vectores \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 representan a la periodicidad espacial del cristal en sus respectivas direcciones. En el caso de estructuras atómicas cristalinas bidimensionales, existen 5 posibles arreglos, denominadas redes de Bravais (ver figura 8).

Algunas redes cristalinas son descritas en términos de una celda unitaria no primitiva. Esto significa que los puntos de red no solo se encuentran en los bordes del área definida por los vectores de base de la red, si no que también existen nodos en el interior de ella. Las celdas unitarias no primitivas se usan porque describen la simetría y contienen la información cristalográfica completa de la red, permitiendo realizar simplificaciones numéricas. En este trabajo se utiliza la celda unitaria para modelar redes infinitas de cristales fonónicos, aplicando condiciones de periodicidad en los bordes de la celda unitaria.

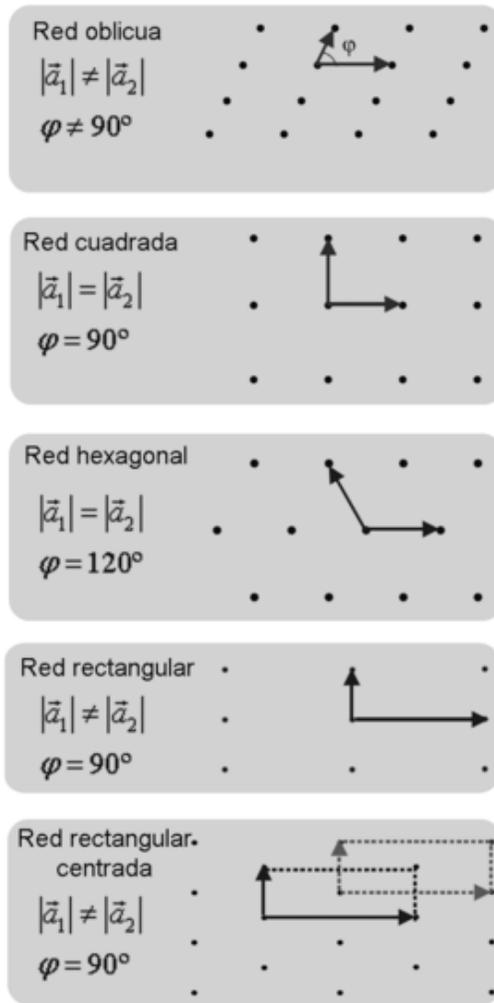


Figura 8: Redes de Bravais bidimensionales.

1.3.1. Red Recíproca

Los vectores de red o vectores primitivos de la red cristalina, matemáticamente definen a través de su combinación lineal un subespacio geométrico denominado red directa, a partir del cual es posible construir una red secundaria denominada red recíproca. La red recíproca es útil para estudiar fenómenos físicos de comportamiento ondulatorio sobre las estructuras cristalinas. Por ejemplo, el espacio recíproco obtenido de las redes de Bravais (figura 8) corresponden a las direcciones del cristal en las que se produce difracción.

Para determinar la red recíproca de forma gráfica, se deben considerar a la familia de planos paralelos y orientados de forma que atraviesen al menos tres puntos de la red asociada a un cristal tridimensional. Como resultado, la distancia interplanar será característica de cada subconjunto de planos. Análogamente, para el caso de una estructura asociada a una red bidimensional, se utiliza al conjunto de rectas paralelas que atraviesan al menos dos puntos de la red directa. Una vez que son identificadas los planos o las rectas pertenecientes a una familia, se proyecta sobre algún punto arbitrario que pertenezca a todos los subconjuntos, un vector normal a cada plano (recta en el caso 2-D), y con una magnitud igual al inverso de la distancia interplanar (entre rectas en el caso 2-D) característica, tal como se muestra

en la figura 9. Los extremos de estos vectores (flechas azules en la figura 9) forman también una red periódica de puntos, que por esa propiedad de reciprocidad recibe el nombre de red recíproca [3].

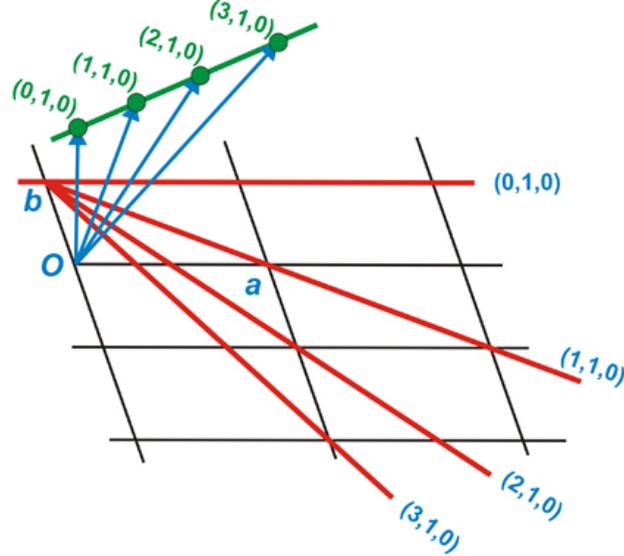


Figura 9: Construcción de algunos puntos de la red recíproca a partir de la red directa [3].

La red recíproca se expresa matemáticamente a través de la función delta de Kronecker:

$$\delta_{ij} = \mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j^* = \begin{cases} 1 & \text{si } i = j \\ 0 & \text{si } i \neq j \end{cases} \quad (1.3)$$

Donde \mathbf{x}_i representa a los vectores de red directa y \mathbf{x}_j^* a la base vectorial de la red recíproca. A partir de la ecuación 1.3, se deduce que cada vector de la red directa se puede emparejar con un vector perpendicular de la base de la red recíproca.

Para estudiar la respuesta vibratoria de un cristal, la red recíproca habitualmente se escala por una magnitud de 2π , con el fin de poder expresar las coordenadas del vector onda en función de la misma base vectorial de la red recíproca. De este modo, la base de la red recíproca representa todas las direcciones posibles de propagación de la onda, mientras que la distancia entre los puntos de red recíproca representa la transmisión completa de un ciclo de oscilación a través de la celda (longitud de onda equivalente al tamaño de la celda). Por esta propiedad, la red recíproca también se denomina *espacio - k*. En la figura 10 se muestran el espacio recíproco formado por una red cuadrada y hexagonal, junto con sus relaciones geométricas.

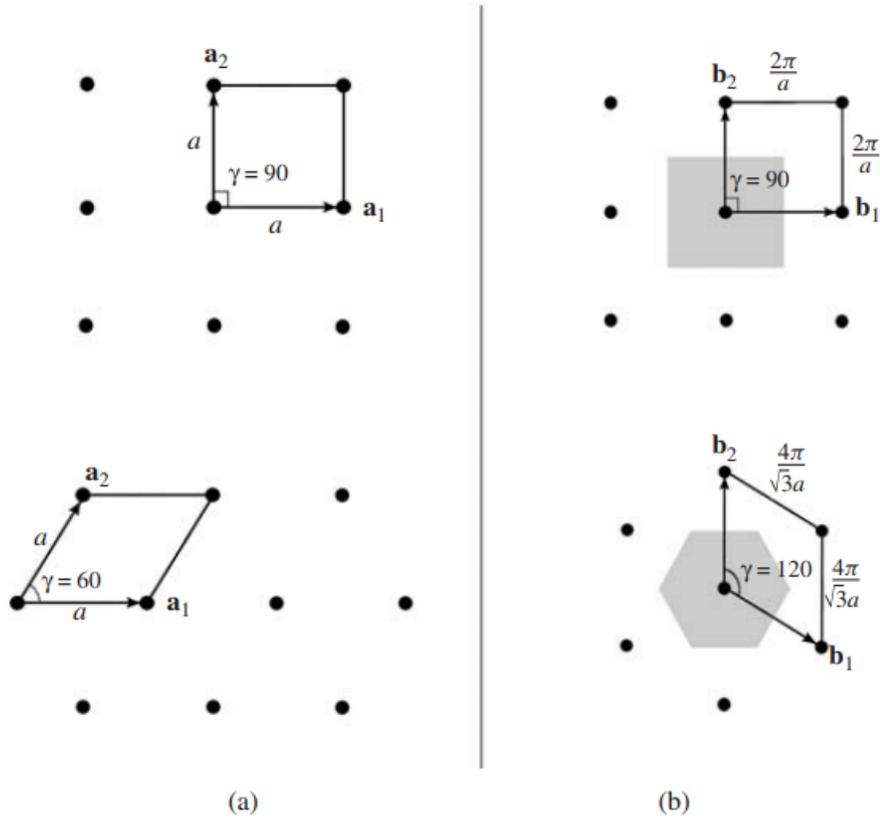


Figura 10: Celdas unitarias cuadrada y hexagonal representadas en (a) red real; (b) red recíproca [1].

1.3.2. Zona Irreductible de Brillouin

Las zonas de Brillouin son geometrías únicas de una red cristalina, generadas por la intersección de los planos de Bragg en el espacio recíproco. Los planos de Bragg en una red recíproca bisectan a los vectores que unen a dos puntos de red adyacentes, como se muestra en la figura 11. La primera zona de Brillouin corresponde a la celda unitaria trazada por los planos de Bragg de mayor proximidad al punto de origen. Luego, los planos ubicados en el segundo lugar más cercano crean la segunda zona de Brillouin, y sucesivamente las siguientes zonas hasta el infinito.

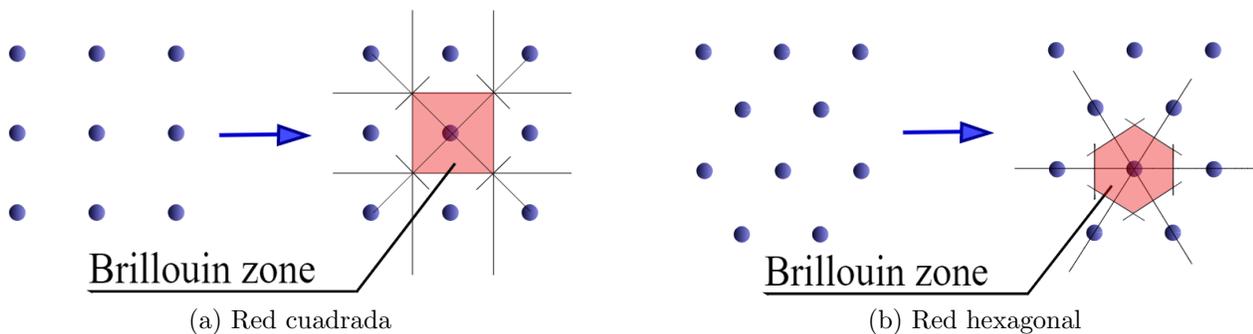


Figura 11: Primeras zonas de Brillouin en planos bidimensionales.

La importancia de la primera zona de Brillouin (de ahora en adelante BZ), radica en la aplicación del teorema de Bloch para imponer condiciones de periodicidad sobre su contorno. En una estructura cristalina, la relación de dispersión de cualquier tipo de onda también es periódica y BZ es el espacio de repetición más pequeño que existe dentro de ella, de modo que, para un cristal infinitamente grande, si la relación de dispersión de una onda está definida en BZ, entonces quedará definida a través del espacio recíproco por completo [26].

Generalmente se utilizan topologías de celda tales que al superponer BZ con la celda unitaria, sea posible identificar simetrías horizontales, verticales y oblicuas al mismo tiempo. En estos casos, la sección de menor tamaño trazada por los ejes de simetría al interior de BZ se denomina zona irreductible de Brillouin o zona de máxima simetría. Esto permite reducir el problema de caracterización de la onda sobre toda la estructura, al recorrido de la onda sobre el perímetro de la zona de máxima de simetría. En el esquema de la figura 12, se muestran las zonas irreductibles de Brillouin para una red cuadrada y hexagonal, con condiciones impuestas de simetría, indicando sus geométricas con la celda unitaria.

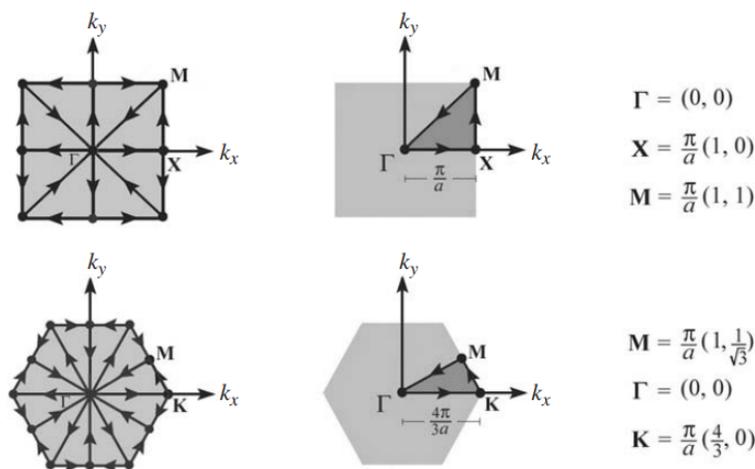


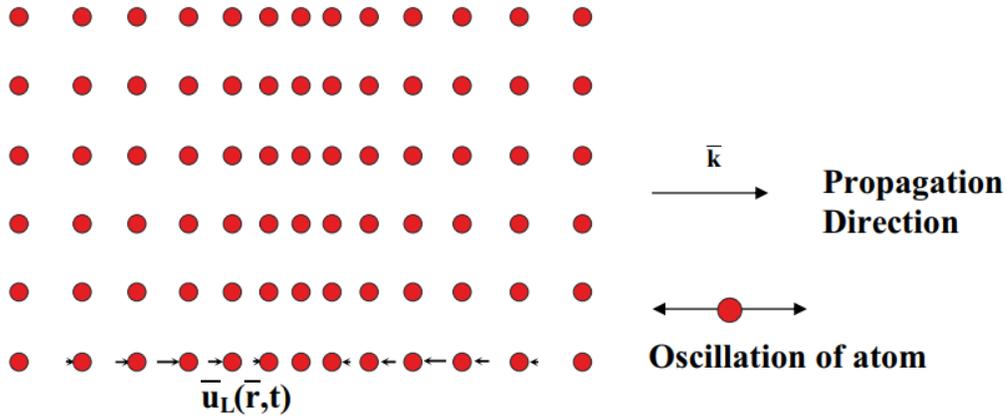
Figura 12: Zona irreductible de Brillouin de celdas unitarias cuadradas y hexagonales en el espacio recíproco [4].

1.4. Mecanismos de Propagación de una Onda Elástica

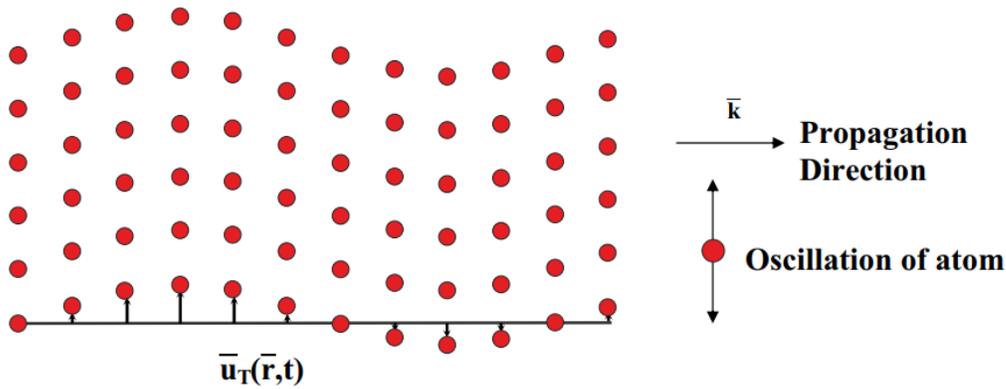
En una estructura atómica cristalina ideal y libre de defectos, los átomos están en constante movimiento alrededor de sus posiciones de equilibrio. Sin embargo, los átomos de un sólido no pueden moverse de forma independiente, si no que están acoplados al movimiento de los átomos vecinos a través de enlaces químicos. Cuando un átomo se desplaza de su posición de equilibrio, ejerce una fuerza sobre los átomos vecinos, haciendo que se desplacen. Éstos a su vez provocan que sus vecinos se muevan y el resultado final es la creación de un fonón, es decir, una onda de distorsión reticular que se propaga a través del sólido. Este fenómeno se reproduce de forma análoga a macro escala en los cristales fonónicos. En las estructuras celulares periódicas, los nodos de la celda unitaria se encuentran unidos por elementos sólidos que transmiten esfuerzos de compresión y de corte desde un extremo a otro, y a partir de este último extremo, se transmiten los esfuerzos hacia las uniones vecinas.

1.4.1. Función de Onda Plana

En un medio sólido homogéneo y continuo, las vibraciones se propagan a través de una onda plana elástica, denominada así por que sigue una dirección única y con una frecuencia constante. La dirección de propagación se representa a través del vector de onda \mathbf{k} , mientras que el vector $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ indica la magnitud y dirección del desplazamiento instantáneo de un elemento volumétrico posicionado en \mathbf{r} . Si el vector de onda y el vector desplazamiento son paralelos, la onda plana es longitudinal (figura 13a). Por el contrario, si son perpendiculares entonces la onda es transversal (figura 13b).



(a) Propagación de una onda elástica longitudinal



(b) Propagación de una onda elástica transversal

Figura 13: Propagación de ondas longitudinales y transversales en un sólido cristalino de dos dimensiones. Las ondas se propagan horizontalmente con el vector de onda \mathbf{k} .

La propiedad distintiva de las ondas mecánicas a través de materiales sólidos homogéneos, es que se pueden propagar al mismo tiempo ondas elásticas longitudinales y transversales, donde cada una es independiente de la otra y presentan velocidades de propagación diferentes. La velocidad con la que una onda plana longitudinal se propaga a través de un sólido se denota por \mathbf{c}_L y la velocidad de propagación de una onda plana transversal se denota por \mathbf{c}_T . Las ondas elásticas longitudinales y transversales que se propagan a una frecuencia ω al interior de un sólido homogéneo se describen a través de la función de onda plana [1]:

$$\mathbf{u}_L(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{u}_{L0} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}] \quad (1.4)$$

$$\mathbf{u}_T(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{u}_{T0} e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}] \quad (1.5)$$

Donde $\mathbf{u}_T(\mathbf{r}, t)$ y $\mathbf{u}_L(\mathbf{r}, t)$ son los vectores de desplazamiento instantáneo transversal y longitudinal respectivamente; i es la unidad compleja; \mathbf{k} es el vector de onda; Re es la parte real de la expresión; y \mathbf{u}_{T0} y \mathbf{u}_{L0} las amplitudes del vector desplazamiento. También es posible expresar las ecuaciones 1.4 y 1.5 en función del periodo de oscilación (T) y la longitud de onda (λ'), a través de las relaciones siguientes:

$$\omega = \frac{2\pi}{T} \quad (1.6)$$

$$|\mathbf{k}| = \frac{2\pi}{\lambda'} \quad (1.7)$$

Además, la propagación de ondas elásticas al interior de un sólido homogéneo cumple con las ecuaciones de onda elástica:

$$\nabla^2 \mathbf{u}_T = \frac{1}{\mathbf{c}_T} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_T}{\partial t^2} \quad (1.8)$$

$$\nabla^2 \mathbf{u}_L = \frac{1}{\mathbf{c}_L} \frac{\partial^2 \mathbf{u}_L}{\partial t^2} \quad (1.9)$$

Reemplazando la función de onda plana (ec. 1.5 y 1.4) en la ecuación de onda elástica (ec. 1.8 y 1.9) se obtiene la relación que existe entre el vector de onda (\mathbf{k}) y la frecuencia (ω):

$$k = |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{\mathbf{c}_T} \quad \text{para ondas transversales} \quad (1.10)$$

$$k = |\mathbf{k}| = \frac{\omega}{\mathbf{c}_L} \quad \text{para ondas longitudinales} \quad (1.11)$$

A las ecuaciones 1.10 y 1.11 se les denomina como relación de dispersión de una onda elástica plana. Las velocidades de propagación dependen de las propiedades mecánicas del medio sólido, cumpliendo con las siguientes relaciones:

$$\mathbf{c}_T = \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} \quad (1.12)$$

$$\mathbf{c}_L = \sqrt{\frac{\lambda + 2\mu}{\rho}} \quad (1.13)$$

Donde ρ es la densidad y μ y λ son los parámetros de Lamé, que son dos constantes elásticas que caracterizan por completo el comportamiento elástico lineal de un sólido isotrópico en pequeñas deformaciones. Estos parámetros se relacionan implícitamente con el módulo de elasticidad (E) y el coeficiente de poisson (ν) del material a través de las siguientes fórmulas:

$$\lambda = \frac{E\nu}{(1 + \nu)(1 - 2\nu)} \quad (1.14)$$

$$\mu = \frac{E}{2(1 + \nu)} \quad (1.15)$$

En sólidos no homogéneos, como es el caso de los cristales fonónicos binarios solidos-solidos, para determinar el comportamiento de la onda elástica e identificar band gaps fonónicos se necesitan cinco parámetros independientes y característicos de la topología de celda unitaria: λ_2/λ_1 , μ_2/μ_1 , ρ_2/ρ_1 , μ_2/λ_1 y \bar{f} ; donde λ_j , μ_j , ρ_j con $j = 1, 2$ denotan a los parámetros de Lamé y a la densidad de los materiales 1 y 2, mientras que \bar{f} es la fracción de volumen ocupado por el segundo material al interior del primero [20]. Se debe destacar que los coeficientes de Lamé que describen a los materiales constituyentes no son siempre cantidades reales y constantes, si no que podrían ser nulos o incluso dependientes de la frecuencia. En cristales fonónicos de matriz fluida, si el líquido es un fluido normal (como el agua), entonces $\mu_1 = 0$ y por lo tanto, las ondas acústicas transversales son suprimidas (solo se transmiten esfuerzos de compresión). Sin embargo, este no es el caso de un fluido visco-elástico [27].

1.4.2. Relación de Dispersión

Aún si se consideran materiales constituyentes para un cristal fonónico que cuenten con parámetros característicos reales y positivos, la relación entre la frecuencia (ω) y el vector de onda (\mathbf{k}) es mucho más compleja de obtener que para los sólidos homogéneos. Para determinar la relación de dispersión de un sólido homogéneo se utilizan las ecuaciones 1.10 y 1.11 dependiendo del tipo de onda (longitudinal o transversal). En contraposición, la relación de dispersión de los cristales fonónicos se obtiene a través de una función $\omega = \omega(\mathbf{k})$. La relación de dispersión $\omega = \omega(\mathbf{k})$ es relevante para los cristales fonónicos, ya que permite explorar de forma gráfica la presencia de band gaps, a través de diagramas de bandas, como en el ejemplo de la figura 4.

1.4.3. Teorema de Bloch

El teorema de Bloch expresa que el cuadrado del módulo de la función de onda ($|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$), sobre un nodo perteneciente a un arreglo periódico, es invariante respecto de la posición del nodo. Por lo que, si se denomina a \mathbf{R} como la periodicidad de la red asociada a los vectores primitivos de la celda unitaria que la conforma, se cumple la siguiente relación:

$$\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) e^{i2\pi s} \quad (1.16)$$

$$|\Psi(\mathbf{r} + \mathbf{R}, t)|^2 = |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (1.17)$$

En la ecuación 1.16, s puede tomar cualquier valor real mientras que i representa a la unidad imaginaria. Aplicando el teorema de Bloch, es posible describir las funciones de onda de una red completa a través de una única celda, imponiendo sobre ella las condiciones de borde de periodicidad señaladas por la ecuación 1.16.

En cristales fonónicos infinitos tipo sólido-sólido, las ondas elásticas no se propagan como ondas planas, sino que se propagan como ondas de Bloch. Es importante destacar que, en el caso más general, una onda de Bloch elástica que se propaga dentro de un cristal no homogéneo, no es transversal ni longitudinal. La onda mecánica de Bloch, que se propaga con un vector de onda (\mathbf{k}), se representa mediante la fórmula:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega(\mathbf{k})t)}] \quad (1.18)$$

Donde $\mathbf{f}_{\mathbf{k}}$ es una función vectorial periódica específica para cada vector de onda (\mathbf{k}), que modula a la senoide del término de la exponencial compleja. Además, la función vectorial presenta el mismo período espacial que el cristal fonónico, satisfaciéndose la siguiente relación:

$$\mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) \quad (1.19)$$

Es común expresar el teorema de Bloch (ec. 1.18) reagrupando los términos espaciales y temporales con el fin de visualizar las propiedades de periodicidad de la onda:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = \text{Re} [\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\omega(\mathbf{k})t}] \quad (1.20)$$

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.21)$$

De esta forma, la relación de dispersión $\omega(\mathbf{k})$ puede obtenerse de forma numérica reemplazando la ecuación 1.20, en la ecuación de onda elástica (ec. 1.8 y ec. 1.9):

$$\nabla \cdot \left(\rho c_T^2 \nabla u_j + \rho c_T^2 \frac{\partial \mathbf{u}_{\mathbf{k}}}{\partial x_j}(\mathbf{r}) \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} ((\rho c_L^2 - 2\rho c_T^2) \nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})) = -\rho (\omega(\mathbf{k}))^2 u_j \quad (1.22)$$

Donde j representa el j -ésimo componente del espacio cartesiano; $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es el vector de desplazamiento espacial y su proyección sobre los ejes cartesianos es u_j ; $\rho = \rho(\mathbf{r})$, $c_T = c_T(\mathbf{r})$ y $c_L = c_L(\mathbf{r})$ son, respectivamente, la densidad y las velocidades transversal y longitudinal, que describen las propiedades mecánicas de un cristal fonónico.

La solución de la ecuación 1.22 también determina la deflexión o los vectores de desplazamiento espacial $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, y en consecuencia, la deflexión instantánea $\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t)$ de la onda elástica de Bloch al interior del cristal fonónico.

1.4.4. Propagación de Ondas Elásticas en Cristales Fonónicos

De acuerdo con la ecuación 1.22, en medios sólidos que combinen propiedades de materiales distintos, la solución de la función de onda de Bloch se encuentra en alguno de los casos siguientes:

- En cristales fonónicos unidimensionales (o en capas), las componentes del vector de desplazamiento o deflexión $\mathbf{u}_{\mathbf{k}} = [u_x(\mathbf{r}), u_y(\mathbf{r}), u_z(\mathbf{r})]$, son completamente independientes. Por lo tanto, las ondas elásticas pueden propagarse como ondas de Bloch longitudinales o como ondas de Bloch transversales con un vector de onda (\mathbf{k}) perpendicular a las capas, tal como se muestra en el esquema de la figura 14.

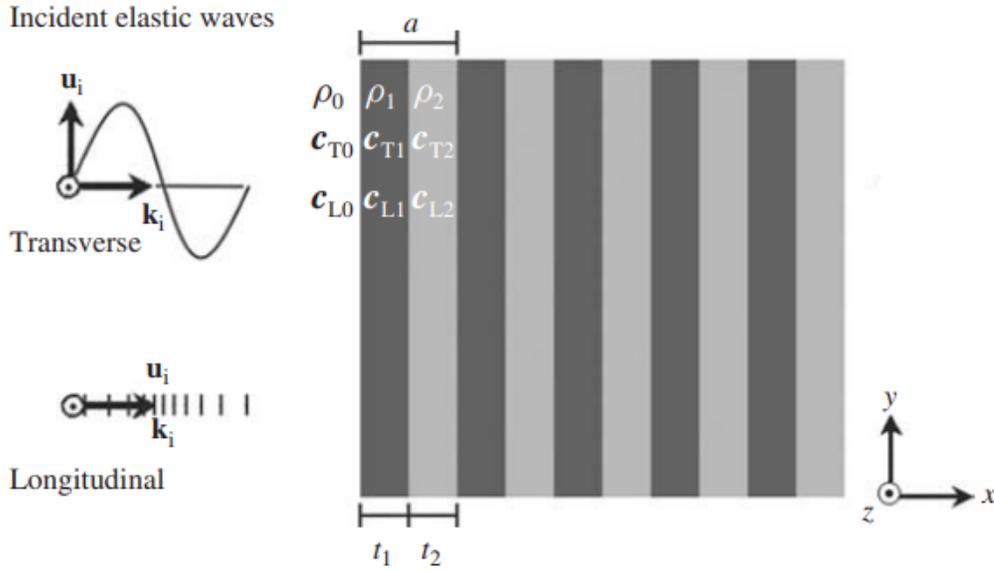


Figura 14: Cristal fonónico unidimensional e infinito. La estructura periódica alterna capas de dos materiales sólidos de propiedades constitutivas distintas [1].

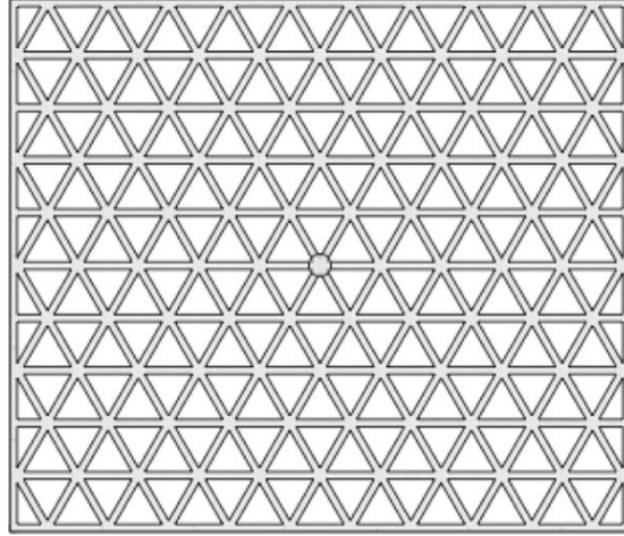
- En cristales fonónicos bidimensionales, las componentes del vector de desplazamiento ($\mathbf{u}_{\mathbf{k}}$) pertenecientes al plano definido por el cristal se encuentran acopladas, mientras que la deflexión perpendicular al plano es independiente. De este modo, las ondas elásticas pueden propagarse como ondas de Bloch acopladas al interior del plano (in-plane elastic Bloch waves), o como ondas de Bloch transversales fuera del plano (out-of-plane transverse elastic Bloch waves).
- En cristales fonónicos tridimensionales las componentes del vector de desplazamiento ($\mathbf{u}_{\mathbf{k}}$) por lo general se encuentran acopladas, por lo que las ondas elásticas no se propagan de forma longitudinal ni transversal.

1.4.5. Sistemas Discretos y Estructuras Celulares

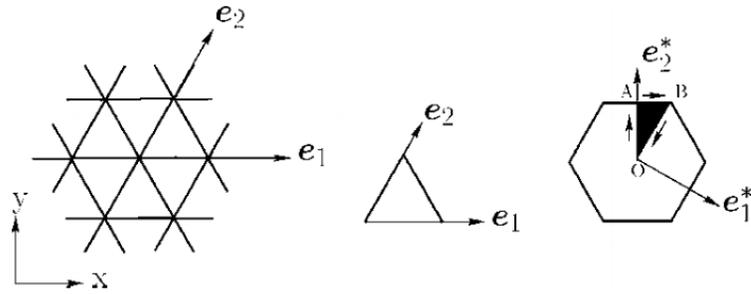
Las estructuras celulares como las mostradas en la figura 6, pueden ser modeladas como una colección de elementos lineales cuyas uniones pueden ser representadas directamente

como los nodos de una red directa. En la figura 15 se ejemplifica una estructura celular bidimensional con un arreglo de tipo panal de abeja triangular, donde sus uniones conforman los puntos de una red directa. Utilizando la notación de la sección 2.3., si \mathbf{r} es punto arbitrario de la red, el punto ubicado en la j -ésima posición se expresará como:

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{r} + a_j \mathbf{x}_1 + b_j \mathbf{x}_2 \quad (1.23)$$



(a)



(b)

Figura 15: Estructura celular tipo panal triangular: (a) representación de la estructura; (b) representación en la red directa y red recíproca, señalando la zona irreductible de Brillouin [4].

Donde \mathbf{x}_1 y \mathbf{x}_2 son los vectores de red directa. Por lo tanto, cualquier posición de un nodo en la red directa se puede representar mediante el par de coordenadas (a_j, b_j) , donde a_j y b_j son números enteros.

Aplicando el teorema de Bloch, se puede remplazar la expresión 1.23 en las ecuación 1.20:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_j) = \mathbf{f}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + a_j \mathbf{x}_1 + b_j \mathbf{x}_2) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} e^{i\mathbf{k} \cdot (a_j \mathbf{x}_1 + b_j \mathbf{x}_2)} \quad (1.24)$$

En virtud de la propiedad 1.19, la ecuación 1.24 es equivalente a:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}_j) = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot (a_j \mathbf{x}_1 + b_j \mathbf{x}_2)} = \mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i(a_j \mathbf{k}_1 + b_j \mathbf{k}_2)} \quad (1.25)$$

La expresión final de la ecuación 1.25 muestra que el desplazamiento de un nodo desde su posición de equilibrio no depende de su ubicación espacial en la red periódica, si no que depende de los componentes del vector de onda ($\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$) proyectados sobre los vectores de red, tal como lo plantea el teorema de Bloch. Examinando el término de la exponencial compleja se pueden realizar las siguientes distinciones si se reagrupan los términos reales y complejos:

$$i\mathbf{k}_1 = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_1 = \delta_1 + i\epsilon_1 \quad (1.26)$$

$$i\mathbf{k}_2 = i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}_2 = \delta_2 + i\epsilon_2 \quad (1.27)$$

donde la parte real δ y la parte compleja ϵ se denominan constantes de atenuación y de fase, respectivamente. El coeficiente δ es una medida de atenuación de la onda mientras se propaga desde una celda hacia otra, mientras que el coeficiente de fase indica la diferencia de fases entre celdas contiguas. Para el caso de ondas que se propagan sin atenuación, el coeficiente de atenuación es 0 y las componentes del vector de onda se reducen a los coeficientes de fase $|\mathbf{k}_1| = \epsilon_1$ y $|\mathbf{k}_2| = \epsilon_2$.

La aplicación del teorema de Bloch directamente sobre los puntos de red, permite discretizar el problema de caracterización de la onda, ya que en este caso se determinan las deflexiones puntuales de la estructura, permitiendo expresar la función de onda a través de un sistema de ecuaciones lineales. Por lo tanto, es posible analizar a la celda unitaria de una material celular como el de la figura 15 a través de elementos finitos lineales de forma equivalente a como se analiza el comportamiento dinámico de estructuras, y luego, a través del teorema de Bloch, caracterizar al material por completo.

La aplicación de métodos de elementos finitos (FEM) para obtener las funciones de dispersión de la onda, se puede extender al cálculo de estructuras más complejas para discretizar cristales fonónicos de medios continuos [5]. Sin embargo, dependiendo de la exactitud y el rango de discretización deseados, y la cantidad de valores propios buscados, el costo en términos computacionales puede ser considerable. Este costo se multiplica dependiendo de la cantidad de vectores de onda computados. En la figura 16a se muestra un modelo de elementos finitos para una celda unitaria rectangular 2-D compuesta de una matriz y una fibra (zona oscurecida). En la figura 16b se muestra una celda cuadrada genérica que ha sido discretizada para un arreglo periódico 2-D.

Los grados de libertad (\mathbf{u}) del modelo discretizado se pueden agrupar dependiendo de si se ubican en los bordes de la celda, tal como se señala en la figura 16. Los grados de libertad al interior de la celda se definen como desplazamientos internos (\mathbf{u}_I), mientras que en el borde se definen como desplazamientos de interfase (\mathbf{u}_A):

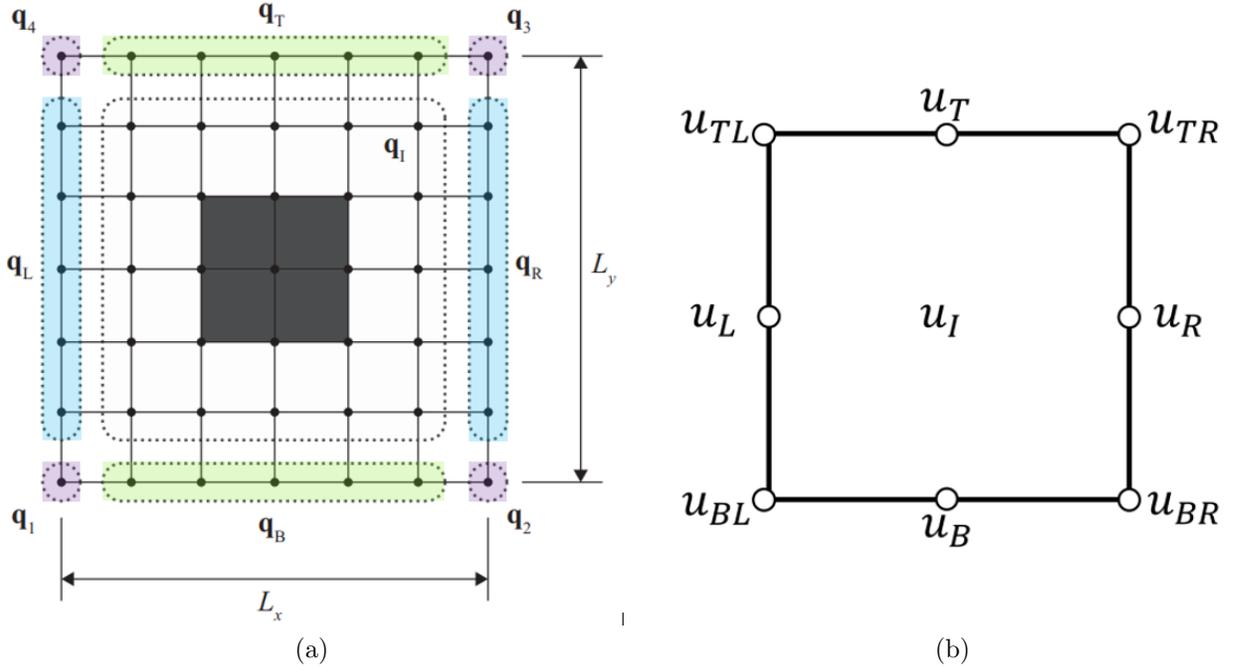


Figura 16: Representación de una celda unitaria 2-D discretizada, agrupando las ubicaciones de sus grados de libertad [5].

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_A \\ \mathbf{u}_I \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_L \\ \mathbf{u}_R \\ \mathbf{u}_B \\ \mathbf{u}_T \\ \mathbf{u}_{LB} \\ \mathbf{u}_{RB} \\ \mathbf{u}_{LT} \\ \mathbf{u}_{RT} \\ \mathbf{u}_I \end{bmatrix} \quad (1.28)$$

Donde:

- \mathbf{u}_L y \mathbf{u}_R corresponde al vector de desplazamientos de los puntos pertenecientes al borde izquierdo y derecho de la celda, respectivamente.
- \mathbf{u}_B y \mathbf{u}_T corresponde al vector de desplazamientos de los puntos pertenecientes al borde inferior y superior de la celda, respectivamente.
- \mathbf{u}_{LB} , \mathbf{u}_{RB} , \mathbf{u}_{LT} y \mathbf{u}_{RT} corresponden a los desplazamientos de los puntos esquina, en el siguiente orden: inferior izquierdo, inferior derecho, superior izquierdo y superior derecho
- \mathbf{u}_I corresponde al vector de desplazamientos de los puntos internos de la celda.

Aplicando las condiciones de periodicidad de la ecuación 1.25 en los bordes, se obtienen las siguientes relaciones:

$$\begin{aligned}
\mathbf{u}_R &= \mathbf{u}_L e^{i(\mathbf{k} \cdot L_X \hat{\mathbf{x}}_1)} \\
\mathbf{u}_T &= \mathbf{u}_B e^{i(\mathbf{k} \cdot L_Y \hat{\mathbf{x}}_2)} \\
\mathbf{u}_{RB} &= \mathbf{u}_{LB} e^{i(\mathbf{k} \cdot L_X \hat{\mathbf{x}}_1)} \\
\mathbf{u}_{LT} &= \mathbf{u}_{LB} e^{i(\mathbf{k} \cdot L_Y \hat{\mathbf{x}}_2)} \\
\mathbf{u}_{RT} &= \mathbf{u}_{LB} e^{i(\mathbf{k} \cdot (L_X \hat{\mathbf{x}}_1 + L_Y \hat{\mathbf{y}}_2))}
\end{aligned} \tag{1.29}$$

A partir de las relaciones que existen entre los grados de libertad, es conveniente definir un vector que sintetice la información de todos los nodos, ya que algunos grados de libertad pueden ser expresados en función de otros:

$$\begin{array}{c} \mathbf{u} \\ \hline \mathbf{u}_L \\ \mathbf{u}_R \\ \mathbf{u}_B \\ \mathbf{u}_T \\ \mathbf{u}_{LB} \\ \mathbf{u}_{RB} \\ \mathbf{u}_{LT} \\ \mathbf{u}_{RT} \\ \mathbf{u}_I \end{array} = \begin{array}{c} \mathbf{P} \\ \hline \mathbf{I} & 0 & 0 & 0 \\ \mathbf{I}e^{i(\mathbf{k} \cdot L_X \hat{\mathbf{x}}_1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{I}e^{i(\mathbf{k} \cdot L_Y \hat{\mathbf{x}}_2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I}e^{i(\mathbf{k} \cdot L_X \hat{\mathbf{x}}_1)} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I}e^{i(\mathbf{k} \cdot L_Y \hat{\mathbf{x}}_2)} & 0 \\ 0 & 0 & \mathbf{I}e^{i(\mathbf{k} \cdot (L_X \hat{\mathbf{x}}_1 + L_Y \hat{\mathbf{y}}_2))} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{I} \end{array} \begin{array}{c} \mathbf{u} \\ \hline \mathbf{u}_L \\ \mathbf{u}_B \\ \mathbf{u}_{LB} \\ \mathbf{u}_I \end{array} \tag{1.30}$$

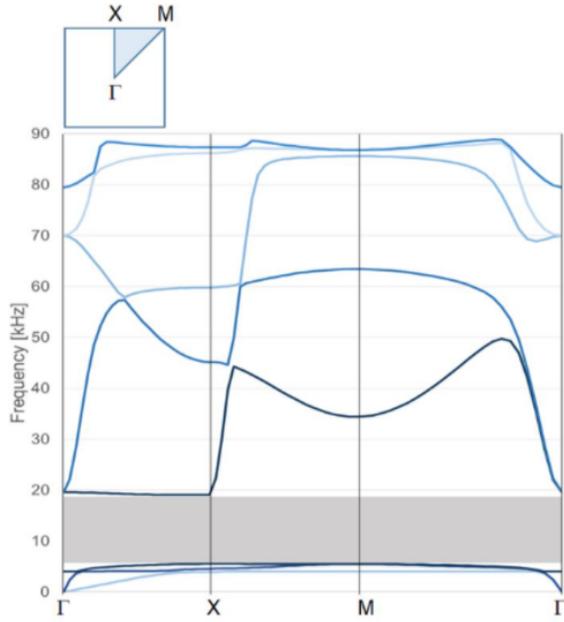
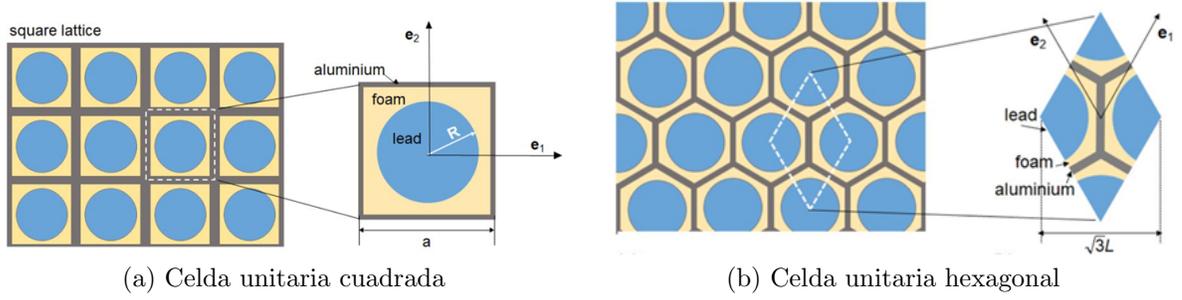
Donde P es la matriz de transformación que contiene las condiciones de borde de periodicidad, mientras que u es el vector reducido de los grados de libertad del problema.

1.5. Estructura de Bandas de Frecuencias

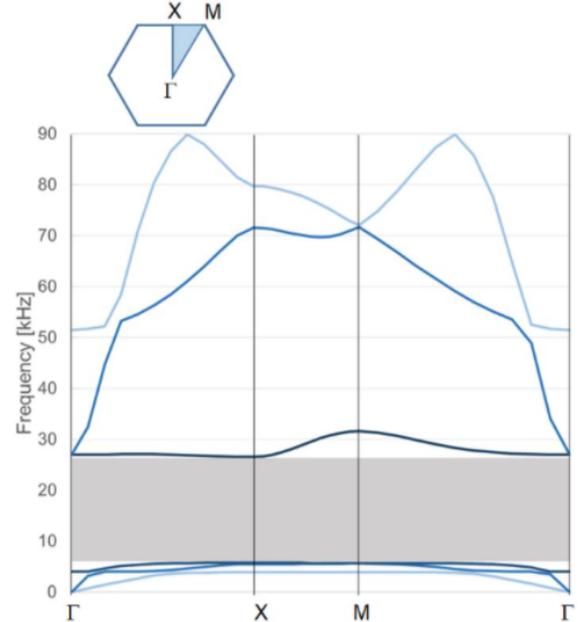
La ecuación 1.22 involucra a las propiedades constitutivas de los materiales del cristal fonónico (ρ, c_T, c_L), junto con tres términos notables: el desplazamiento espacial respecto de la posición de equilibrio ($\mathbf{u}_\mathbf{k}$); el vector de onda (\mathbf{k}) y la relación de dispersión ($\omega(\mathbf{k})$). Independientemente del número de dimensiones de la periodicidad de la estructura, siempre es necesario resolver un problema de valores y vectores propios (auto valores y auto vectores), para encontrar dos de los tres términos señalados, es decir, al menos uno de ellos debe ser conocido.

Generalmente, se aplica la técnica de la relación de dispersión, que consiste en realizar un barrido de vectores de onda (\mathbf{k}) a través del contorno de la zona irreductible de Brillouin y evaluarlos en la matriz de transformación de la ecuación ecuación 1.30. Luego, se calculan los valores propios del problema y en consecuencia, las frecuencias naturales de la estructura. En el caso de cristales bidimensionales, \mathbf{k} se obtiene como:

$$k_x = \begin{cases} (1-k) \frac{\pi}{a} & \text{si } 0 < k < 1 \\ (k-1) \frac{\pi}{a} & \text{si } 1 < k < 2 \\ \frac{\pi}{a} & \text{si } 2 < k \leq 3 \end{cases}; k_y = \begin{cases} (1-k) \frac{\pi}{a} & \text{si } 0 < k < 1 \\ 0 & \text{si } 1 < k < 2 \\ (k-2) \frac{\pi}{a} & \text{si } 2 < k \leq 3 \end{cases} \tag{1.31}$$



(c) Espectro de dispersión calculado sobre la red cuadrada



(d) Espectro de dispersión calculado sobre la red hexagonal

Figura 17: Estructura de bandas en cristales bidimensionales [6].

Donde k_x y k_y son los componentes del vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, k es un factor que se encuentra en el intervalo $[0, 3]$ y a es la periodicidad de la red, A través de este método, se pueden graficar las frecuencias naturales en función de el vector de onda usado para calcularlas, es decir, se representa gráficamente la relación de dispersión de la onda. A este tipo de representación se le denomina estructura de bandas de frecuencias o diagrama de bandas de frecuencias. La figura 17 (c) y (d) muestran los diagramas de bandas calculados sobre un cristal bidimensional cuadrado y hexagonal, respectivamente. En el ejemplo, se encuentra destacado un rango de frecuencias que no está asociado a ningún vector de onda, lo cual indica que no existen vibraciones con frecuencias dentro de ese rango que sean capaces de propagarse, tal como se discute en la sección 2.2.1. Es decir, se denota un band gap fonónico. La magnitud del band gap $\Delta\omega$ se obtiene a partir de la distancia en frecuencias de dos bandas adyacentes:

$$\Delta\omega = \text{mín} \{ \omega(\mathbf{k})_{n+1} \} - \text{máx} \{ \omega(\mathbf{k})_n \} \quad (1.32)$$

A partir de la ecuación 1.32, se define el band gap medio, como la frecuencia central del

rango comprendido por el band gap:

$$\bar{\omega} = \frac{\min \{\omega(\mathbf{k})_{n+1}\} + \max \{\omega(\mathbf{k})_n\}}{2} \quad (1.33)$$

Por otro lado, se denomina band gap relativo η al coeficiente que entrega una medida adimensional de la magnitud del band gap:

$$\eta = \frac{\Delta\omega}{\bar{\omega}} = 2 \frac{\min \{\omega(\mathbf{k})_{n+1}\} - \max \{\omega(\mathbf{k})_n\}}{\min \{\omega(\mathbf{k})_{n+1}\} + \max \{\omega(\mathbf{k})_n\}} \quad (1.34)$$

La ventaja de evaluar el vector de onda sobre la zona irreductible de Brillouin es que se aprovechan las simetrías internas de la celda unitaria, para caracterizar el comportamiento vibratorio en toda la red cristalina, sin tener que evaluar todas las direcciones de propagación, ya que las soluciones también son simétricas. En el ejemplo de la figura 17, ambas geometrías de red presentan simetrías horizontales, verticales y oblicuas al mismo tiempo, de modo que el vector de onda \mathbf{k} se evalúa a través del recorrido delimitado por $\Gamma \rightarrow \mathbf{X} \rightarrow \mathbf{M} \rightarrow \Gamma$.

1.6. Análisis Modal de Estructuras Periódicas

En un sistema de múltiples grados de libertad, como es el caso de un modelo discretizado, el comportamiento vibratorio se puede estudiar a través de la ecuación de movimiento en su forma matricial:

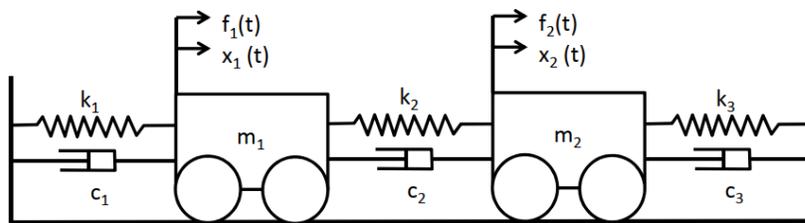
$$\mathbf{M}\ddot{\mathbf{u}} + \mathbf{C}\dot{\mathbf{u}} + \mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (1.35)$$

donde:

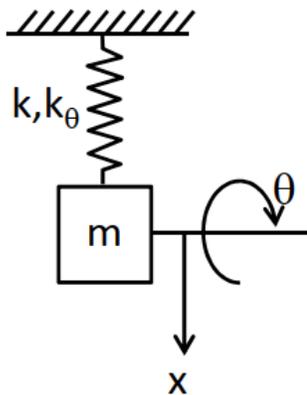
- \mathbf{M} : es la matriz de masas.
- \mathbf{K} : es la matriz de rigidez.
- \mathbf{C} : es la matriz de amortiguación.
- \mathbf{f} : es el vector de fuerzas.
- \mathbf{u} : es el vector de grados de libertad.

La dimensión de las matrices aumenta conforme aumentan los grados de libertad del sistema. En la figura 18 se ilustran ejemplos de distintos sistemas y sus grados de libertad representativos: (a) Sistema de dos masas y resortes con amortiguamiento; (b) sistema masa-resorte que puede rotar sobre su eje; (c) arreglo periódico de masas y resortes en un plano bidimensional.

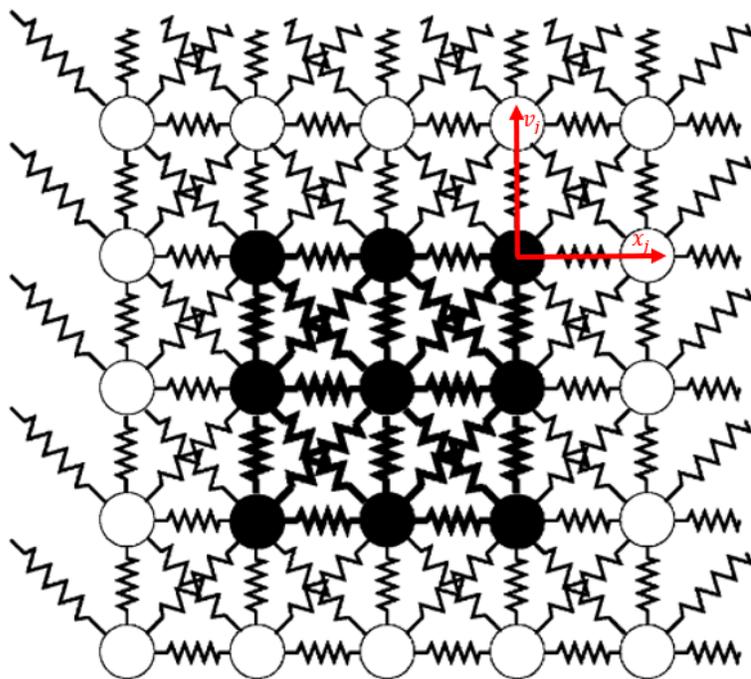
Para medios continuos, las matrices \mathbf{M} , \mathbf{C} y \mathbf{K} pueden ser obtenidas a través de elementos finitos (sección 1.8) o a través del método de diferencias finitas. Esto significa que una celda unitaria de un medio periódico puede ser vista como un componente estructural sin condiciones de contorno. Suponiendo una respuesta armónica en el tiempo y despreciando el amortiguamiento, la solución de la ecuación de movimiento es:



(a)



(b)



(c)

Figura 18: Representación de sistemas con múltiples grados de libertad [7] [8].

$$(\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}) \mathbf{u} = \mathbf{f} \quad (1.36)$$

Para investigar la propagación de una onda a través de las celdas de toda la red periódica, se aplica la condición de periodicidad premultiplicando la ecuación 1.36 por la traspuesta Hermitiana (superíndice H) de la matriz de transformación del teorema de Bloch (ec.1.30):

$$\mathbf{P}^H (\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}) \mathbf{P} \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{P}^H \mathbf{f} \quad (1.37)$$

Donde $\mathbf{u} = \mathbf{P} \tilde{\mathbf{u}}$. A partir de esta transformación, en el caso bidimensional se obtienen las siguientes ecuaciones en coordenadas reducidas:

$$\tilde{\mathbf{K}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \mathbf{P}^H \mathbf{K} \mathbf{P} \quad (1.38)$$

$$\tilde{\mathbf{M}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \mathbf{P}^H \mathbf{M} \mathbf{P} \quad (1.39)$$

donde $\tilde{\mathbf{K}}$ y $\tilde{\mathbf{M}}$ son las matrices globales de rigidez y masas en coordenadas reducidas, y \mathbf{k}_1 y \mathbf{k}_2 las componentes del vector de onda. Si se consideran condiciones de propagación de onda libre ($\mathbf{f} = 0$), se obtiene la siguiente ecuación de autovalores:

$$\mathbf{P}^H (\mathbf{K} - \omega^2 \mathbf{M}) \mathbf{P} \tilde{\mathbf{u}} = \tilde{\mathbf{D}}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \omega) \tilde{\mathbf{u}} = \mathbf{0} \quad (1.40)$$

donde $\tilde{\mathbf{D}}$ es la matriz de rigidez dinámica del sistema, a partir de la cual se pueden extraer las frecuencias naturales reales y los modos de vibración.

1.6.1. Función de Respuesta en Frecuencias

La función de transferencia se obtiene a partir de la ecuación de movimiento (ec. 1.35) evaluada en el dominio de Laplace, asumiendo condiciones iniciales nulas:

$$(\mathbf{M} \{s^2\} + \mathbf{C} \{s\} + \mathbf{K}) \mathbf{X} \{s\} = \mathbf{F} \{s\} \quad (1.41)$$

que se puede escribir como :

$$\mathbf{Z} \{s\} \mathbf{X} \{s\} = \mathbf{F} \{s\} \quad (1.42)$$

donde s es un número complejo y $\mathbf{Z} \{s\}$ la matriz de rigidez dinámica. Invertiendo la matriz $\mathbf{Z} \{s\}$ y acotando el dominio de s al espacio imaginario (dominio de frecuencias), se obtiene la matriz función de respuesta en frecuencias (FRF):

$$\mathbf{H} \{i\omega\} = \frac{\mathbf{X} \{i\omega\}}{\mathbf{F} \{i\omega\}} \quad (1.43)$$

Esta última expresión permite comparar la magnitud de la respuesta (salida) y la magnitud de excitación (entrada). En la figura 19 se muestra la FRF del sistema de dos masas de la figura 18a evaluada sobre la masa 1. Los peaks se producen a las frecuencias de resonancias del sistema global. Por otro lado, las caídas de frecuencia se denominan antiresonancias y son propiedades locales de la estructura que se observan analizando distintos grados de libertad.

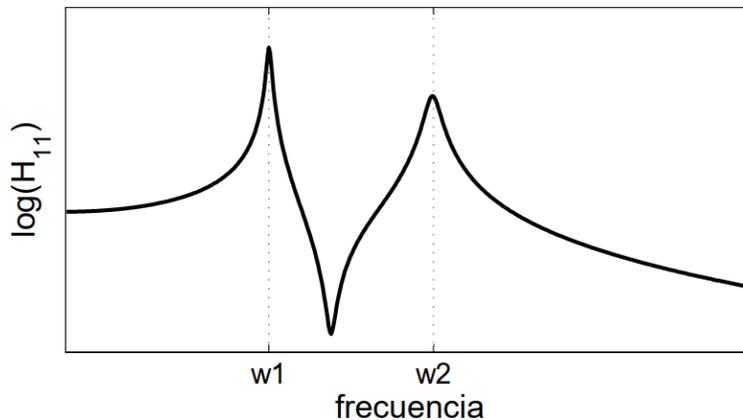


Figura 19: Función de respuesta en frecuencias de un sistema de dos masas y resortes con amortiguamiento [7].

Sobre un sistema de múltiples grados de libertad, cada frecuencia (ω) evaluada obtiene una matriz $\mathbf{H}_{p,q}\{i\omega\}$ diferente. La notación en los subíndices indican que la FRF corresponde a la respuesta del p -ésimo grado de libertad cuando se ejerce una excitación en el grado de libertad q -ésimo. Además, por propiedades de simetría se cumple que:

$$\mathbf{H}_{p,q}\{i\omega\} = \mathbf{H}_{q,p}\{i\omega\} = \frac{\mathbf{X}_q\{i\omega\}}{\mathbf{F}_p\{i\omega\}} = \frac{\mathbf{X}_p\{i\omega\}}{\mathbf{F}_q\{i\omega\}} \quad (1.44)$$

La FRF es una medida de transmisibilidad de un forzamiento armónico entre dos grados de libertad de un sistema, por lo tanto, es posible usarlo para cuantificar la supresión de vibraciones y localizar band gaps.

1.7. Resonancias Locales en Cristales Fonónicos

Las resonancias locales o modos locales se producen cuando un nodo se desplaza de forma independiente de la estructura, a causa de un forzamiento armónico que es cercano a la frecuencia natural del nodo. De acuerdo con [6] y [28], la presencia de modos locales promueve la aparición de band gaps en frecuencias relativamente bajas, del orden de $1[kHz]$. Esto ocurre porque la energía cinética de la onda es absorbida por el resonador, obteniendo como resultado una onda evanescente. Cuando la frecuencia es igual a la frecuencia natural de la masa resonante, teóricamente es posible almacenar la energía cinética de la vibración. En la figura 20(a) se muestra una celda unitaria conformada un núcleo denso con un revestimiento flexible, al interior de una matriz rígida, de modo que el la masa del núcleo se comporta como el resonador mostrado en 20(b).

El sistema de la figura 20 se denomina sistema masa en masa (Mass-in-mass System) [29], el cual manifiesta propiedades efectivas negativas en ciertos rangos de frecuencias. Matemáticamente, la masa efectiva m_{eff} del volumen ocupado por el sistema masa en masa se calcula a partir de la conservación del momento:

$$m_{eff}\dot{\mathbf{u}}_1 = m_1\dot{\mathbf{u}}_1 + m_2\dot{\mathbf{u}}_2 \quad (1.45)$$

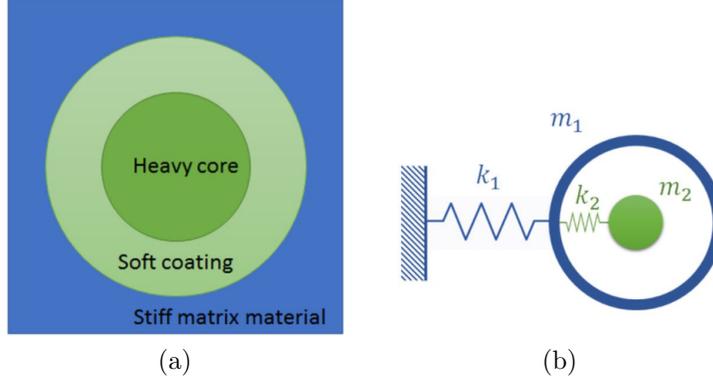


Figura 20: Cristal fonónico 2-D con resonadores internos [6]: (a) Composición de la celda unitaria; (b) Representación idealizada del sistema.

Por otro lado, las ecuaciones de movimiento del sistema son :

$$m_1 \ddot{\mathbf{u}}_1 + k_2(\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) = \mathbf{F} \quad (1.46)$$

$$m_2 \ddot{\mathbf{u}}_2 + k_2(\mathbf{u}_2 - \mathbf{u}_1) = 0 \quad (1.47)$$

Donde \mathbf{F} es un forzamiento armónico de frecuencia ω . Reemplazando las soluciones de la ecuación de movimiento en 1.45 se obtiene que:

$$m_{eff} = m_1 + m_2 \frac{k_2}{k_2 - m_2 \omega^2} = m_1 + m_2 \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_2^2}} \quad (1.48)$$

Donde $\omega_2 = \sqrt{\frac{k_2}{m_2}}$ es la frecuencia natural del resonador. A partir de la ecuación 1.48, se pueden identificar tres posibles situaciones:

- $\omega < \omega_2$ lo que implica que la masa efectiva es positiva y los desplazamientos de ambas masas están en fase (modo acústico).
- $\omega = \omega_2$ por lo que m_2 entra en resonancia y se comporta como un absorbedor de vibraciones. En este caso, la fuerza de restitución elástica del resonador iguala al forzamiento externo, por lo que no hay desplazamiento de la envoltura del resonador y la masa efectiva tiende a infinito.
- $\omega > \omega_2$ lo que implica que las masas oscilan en desfase (modo óptico) favoreciendo la supresión de la onda. Se debe destacar que para valores superiores y cercanos a la frecuencia de resonancia, la masa efectiva se vuelve negativa. Por lo que la onda es completamente inhibida.

L. Driemeier et al. [6] analiza las resonancias locales de un cristal como el de la figura 20 combinando distintos materiales. En este estudio, se comprueba que se producen band gaps fonónicos cuando la masa efectiva es negativa. Además determina que la amplitud del bandgap es favorecida principalmente por la fracción ocupada por el núcleo al interior de la matriz, su densidad y su rigidez. Por otra parte, observa que al aumentar la rigidez de la matriz o su densidad, el band gap se reduce.

De acuerdo con [9], los sistemas masa en masa son análogos a un sistema voladizo en masa (Cantilever-in-mass system, ver figura). En la figura 22 se muestra el diseño de una viga con resonadores en forma de voladizos, que está compuesta por un material único, el cual es capaz de mitigar las ondas a la frecuencia de resonancia diseñada.

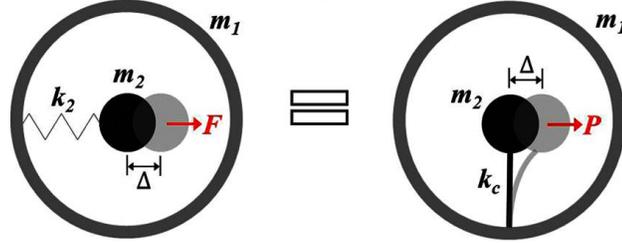


Figura 21: Equivalencia entre celdas unitarias tipo masa en masa y celdas voladizo en masa [9]

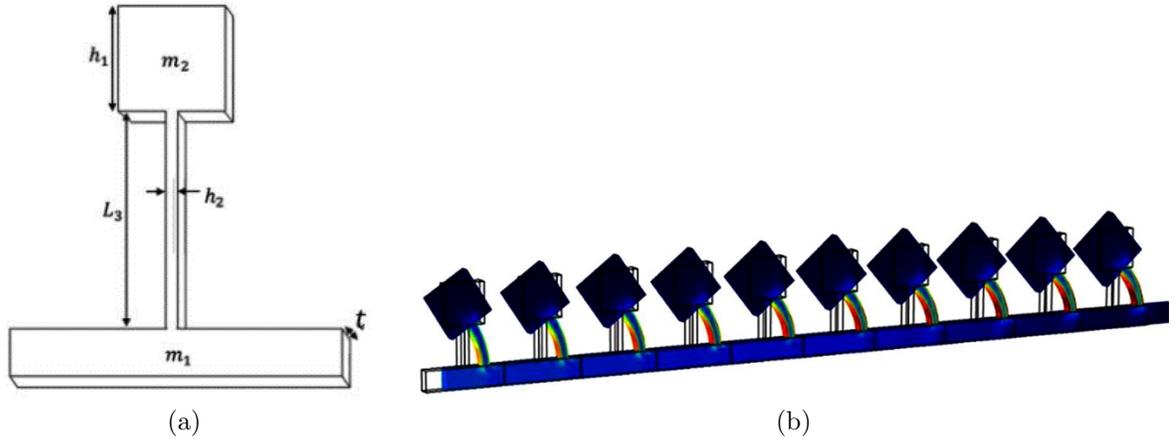


Figura 22: Viga de metamaterial con resonadores en forma de voladizos [9]: (a) Geometría de la celda unitaria; (b) Simulación de elementos finitos del modelo voladizo en masa durante la propagación de ondas.

1.8. Elementos Finitos

Los elementos finitos constituyen un método para modelar medios continuos a través de un número discreto de elementos, y son utilizados en este trabajo para modelar el diseño de la celda unitaria. Éstos pueden ser de tres tipos [7]:

- Elementos unidimensionales (línea; figura).
- Elementos bidimensionales (planos)
- Elementos tridimensionales (sólidos).

De forma general, los desplazamientos nodales ($\hat{\mathbf{u}}$) de cualquier tipo de elemento finito se vincula a su desplazamiento interno ($\mathbf{u}(x)$) a través de funciones de forma ($\mathbf{N}(x)$), que son características de cada elemento:

$$\mathbf{u}(x) = \mathbf{N}(x) \hat{\mathbf{u}} \quad (1.49)$$

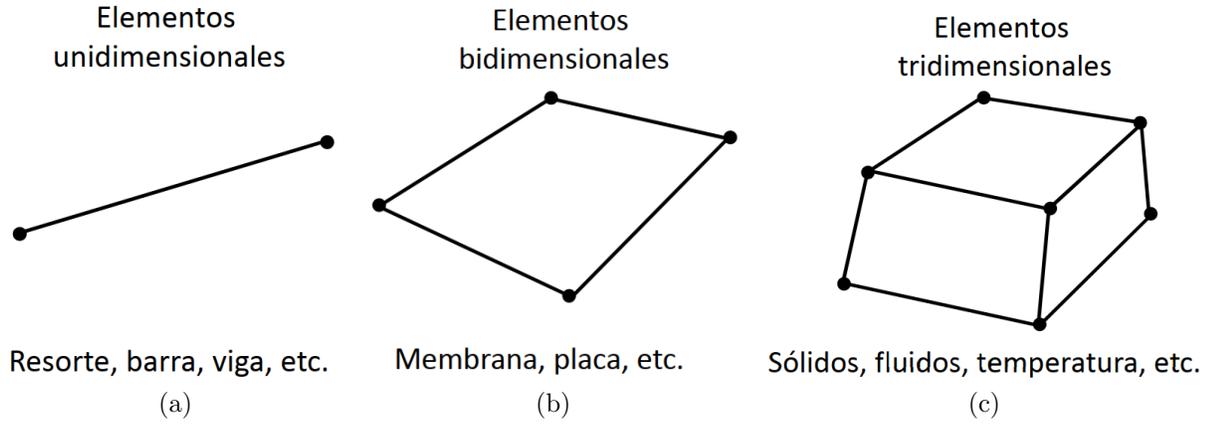


Figura 23: Familias de elementos finitos [7].

Donde x corresponde a las coordenadas espaciales del elemento. A partir del desplazamiento espacial, la deformación se define como:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(x) = \mathbf{B}(x) \hat{\mathbf{u}} \quad (1.50)$$

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{D}\mathbf{N}(x) \quad (1.51)$$

donde \mathbf{D} es un operador diferencial espacial.

Las matrices de rigidez (\mathbf{K}) y de masas (\mathbf{M}) se calculan respectivamente como:

$$\mathbf{K} = \int_V \mathbf{B}^T \mathbf{H} \mathbf{B} \, dV \quad (1.52)$$

$$\mathbf{M} = \int_V \rho \mathbf{N}^T \mathbf{N} \, dV \quad (1.53)$$

Donde \mathbf{H} añade las propiedades constitutivas del material, ρ es la densidad y V el volumen de control.

1.8.1. Métodos Matriciales

Los métodos matriciales de rigidez hacen referencia al método de cálculo de elementos finitos aplicados a estructuras de barras o vigas (elementos lineales) que se comportan de forma elástica y lineal. En el caso de una viga analizada desde la perspectiva bidimensional, cada nodo cuenta con 3 grados de libertad: desplazamiento horizontal, vertical y rotacional. De acuerdo con la teoría de Euler-Bernoulli, los desplazamientos axiales y transversales deben cumplir con las siguientes relaciones respectivamente:

$$EA \frac{\partial^2 \mathbf{u}(x, t)}{\partial x^2} = 0 \quad (1.54)$$

$$EI \frac{\partial^4 \mathbf{v}(x, t)}{\partial x^4} = 0 \quad (1.55)$$



Figura 24: Elemento viga 2-D de Euler-Bernoulli.

Donde $\mathbf{u}(x, t)$ es el desplazamiento longitudinal y $\mathbf{v}(x, t)$ la deflexión transversal; x corresponde al parámetro espacial comprendido en el intervalo definido por los nodos i y j de acuerdo con la viga de la figura 24. Al integrar las ecuaciones 1.54 y 1.55 respecto a la variable espacial, se obtienen respectivamente:

$$\mathbf{u}(x, t) = c_1(t)x + c_2(t) \quad (1.56)$$

$$\mathbf{v}(x, t) = d_1(t)x^3 + d_2(t)x^2 + d_3(t)x + d_4(t) \quad (1.57)$$

Donde las constantes de integración son valores dependientes del tiempo, que deben cumplir con las condiciones de borde del problema:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(0) &= \mathbf{u}_1(t) & \mathbf{u}(l) &= \mathbf{u}_2(t) \\ \mathbf{v}(0, t) &= \mathbf{v}_1(t) & \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}(0, t) &= \boldsymbol{\theta}_1(t) \\ \mathbf{v}(l, t) &= \mathbf{v}_2(t) & \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial x}(l, t) &= \boldsymbol{\theta}_2(t) \end{aligned} \quad (1.58)$$

Donde l representa a la longitud del elemento viga. A partir de las condiciones de borde se deducen las componentes de los desplazamientos nodales:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_1(t) &= c_2 \\ \mathbf{u}_2(t) &= c_1 l + c_2 \\ d_1(t) &= \frac{1}{l^2} [3(\mathbf{v}_1(t) - \mathbf{v}_2(t)) - l(\boldsymbol{\theta}_1(t) + \boldsymbol{\theta}_2(t))] \\ d_2(t) &= \frac{1}{l^2} [3(\mathbf{v}_2(t) - \mathbf{v}_1(t)) - l(2\boldsymbol{\theta}_1(t) + \boldsymbol{\theta}_2(t))] \\ d_3(t) &= \boldsymbol{\theta}_1(t) \\ d_4(t) &= \mathbf{v}_1(t) \end{aligned} \quad (1.59)$$

Reemplazando estas igualdades en las ecuaciones 1.56 y 1.57, se obtiene una aproximación de las deflexiones de la viga:

$$\mathbf{u}(x, t) = \left(1 - \frac{x}{l}\right) \mathbf{u}_1(t) + \frac{x}{l} \mathbf{u}_2(t) \quad (1.60)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{v}(x, t) = & \left[1 - 3\frac{x^2}{l^2} + 2\frac{x^3}{l^3} \right] \mathbf{v}_1(t) + l \left[\frac{x}{l} - 2\frac{x^2}{l^2} + \frac{x^3}{l^3} \right] \boldsymbol{\theta}_1(t) \\ & + \left[3\frac{x^2}{l^2} + 2\frac{x^3}{l^3} \right] \mathbf{v}_2(t) + l \left[-\frac{x^2}{l^2} + \frac{x^3}{l^3} \right] \boldsymbol{\theta}_2(t) \end{aligned} \quad (1.61)$$

Los factores que multiplican a los desplazamientos nodales corresponden a las funciones de forma. Utilizando las expresiones 1.52 y 1.53 para la matriz de rigidez (\mathbf{K}) y de masas (\mathbf{M}) se obtiene:

$$\mathbf{K} = \frac{EI}{L^3} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i & \mathbf{v}_i & \theta_i & \mathbf{u}_j & \mathbf{v}_j & \theta_j \\ \frac{AL^2}{I} & 0 & 0 & -\frac{AL^2}{I} & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 6L & 0 & -12 & 6L \\ 0 & 6L & 4L^2 & 0 & -6L & 2L^2 \\ -\frac{AL^2}{I} & 0 & 0 & \frac{AL^2}{I} & 0 & 0 \\ 0 & -12 & -6L & 0 & 12 & -6L \\ 0 & 6L & 2L^2 & 0 & -6L & 4L^2 \end{bmatrix} \quad (1.62)$$

$$\mathbf{M} = \frac{\rho AL}{410} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i & \mathbf{v}_i & \theta_i & \mathbf{u}_j & \mathbf{v}_j & \theta_j \\ 140 & 0 & 0 & 70 & 0 & 0 \\ 0 & 156 & 22L & 0 & 54 & -13L \\ 0 & 22L & 4L^2 & 0 & 13L & -3L^2 \\ 70 & 0 & 0 & 140 & 0 & 0 \\ 0 & 54 & 13L & 0 & 156 & -22L \\ 0 & -13L & -3L^2 & 0 & -22L & 4L^2 \end{bmatrix} \quad (1.63)$$

Para expresar los desplazamientos en un sistema de coordenadas globales, a las matrices \mathbf{K} y \mathbf{M} se les aplica la transformación de la matriz de rotación (\mathbf{R}):

$$\bar{\mathbf{K}} = \mathbf{R}^T \mathbf{K} \mathbf{R} \quad (1.64)$$

$$\bar{\mathbf{M}} = \mathbf{R}^T \mathbf{M} \mathbf{R} \quad (1.65)$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i & \mathbf{v}_i & \theta_i & \mathbf{u}_j & \mathbf{v}_j & \theta_j \\ \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos \alpha & -\sin \alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sin \alpha & \cos \alpha \end{bmatrix} \quad (1.66)$$

Donde $\bar{\mathbf{K}}$ y $\bar{\mathbf{M}}$ son las matrices globales de rigidez y masas. Es importante señalar que los elementos tipo viga, están definidos en término de un eje neutral, y el espesor del elemento solo se considera de manera indirecta, ya que se asumen como elementos delgados. Sin embargo, en la práctica el espesor puede ser un factor de error importante. Esto se ejemplifica en la figura 25, donde se muestra la unión de 90° entre dos vigas [10].

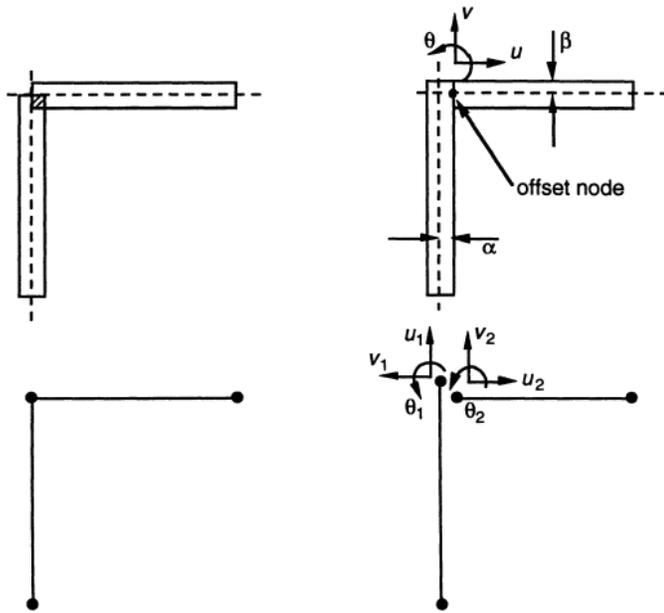


Figura 25: Unión rígida de dos vigas en 90° [10].

1.9. Optimización Topológica

La optimización topológica es un método matemático que selecciona los parámetros de diseño asignados a un material que ha sido discretizado, de modo que se maximice una respuesta deseada. Convencionalmente el material es representado a través de elementos finitos y las propiedades de cada elemento están sujetas a valores en un intervalo definido, permitiendo que cada elemento se transforme en una variable de diseño (dominio de diseño). El dominio de diseño engloba parámetros geométricos, propiedades mecánicas y físicas del material, por lo que es ampliamente usado en problemas de diseño estructural.

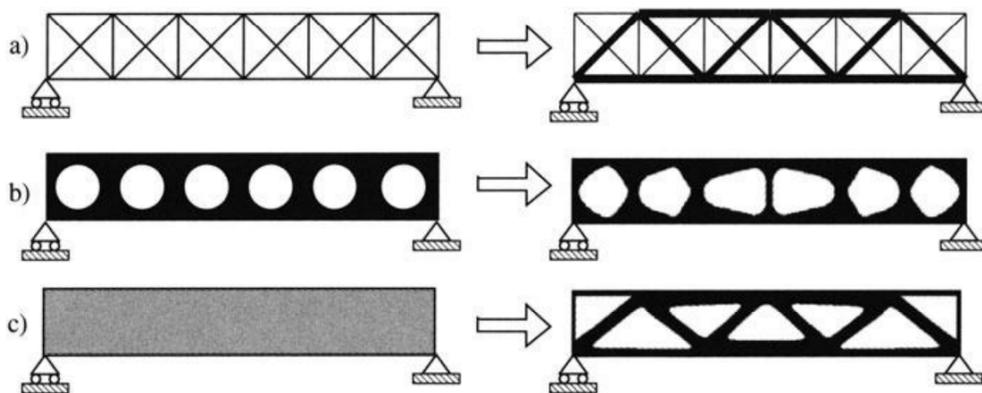


Figura 26: Esquemización de las tres categorías de optimización estructural [11]: (a) Optimización de tamaño; (b) Optimización de forma; (c) Optimización topológica.

De acuerdo con [11], los problemas de diseño estructural pueden ser resueltos en tres niveles de optimización. En primer lugar se encuentra la optimización del tamaño, que busca asignar espesores, densidades o áreas de sección transversal a los elementos que conforman

una estructura. Por otro lado, se define la optimización de forma, que consiste en modificar la forma del contorno definido por la estructura, es decir, la forma de los componentes corresponde al dominio de diseño. Finalmente, se define a la optimización topológica como aquella que involucra la determinación de propiedades, tales como la cantidad, ubicación y forma de agujeros, y la conectividad entre los elementos. En la figura se muestran las soluciones obtenidas de distintos niveles de optimización estructural aplicados sobre la misma estructura inicial.

Si bien la optimización topológica se encuentra dentro del marco de la optimización estructural, se ha extendido el concepto para referirse a la solución de diseños de materiales que involucren procesos físicos, como el diseño de cristales fotónicos y fonónicos [14] [30].

1.9.1. Declaración del Problema de Optimización

El objetivo principal de la optimización topológica en esta investigación, consiste en determinar la estructura óptima de la celda unitaria, que desarrolle el band gap de mayor extensión posible, es decir, se debe maximizar la distancia entre dos bandas adyacentes \mathbf{n} y $\mathbf{n} + 1$. Matemáticamente esto se expresa como:

$$\begin{aligned} \text{máx} \quad & \{\Delta\omega = \text{mín} \{\omega(\mathbf{k})_{n+1}\} - \text{máx} \{\omega(\mathbf{k})_n\}\} \\ \text{s.a} \quad & (\bar{\mathbf{K}}(\mathbf{k}) - \omega^2 \bar{\mathbf{M}}(\mathbf{k})) \mathbf{u} = 0 \quad \forall \mathbf{k} \in [\Gamma, \mathbf{X}, \mathbf{M}, \Gamma] \end{aligned} \quad (1.67)$$

Donde \mathbf{k} se evalúa a través de un barrido en las direcciones $\Gamma, \mathbf{X}, \mathbf{M}, \Gamma$, correspondientes a la zona irreductible de Brillouin. En la literatura también existen otras formas de enunciar el problema de optimización, como maximizar el band gap relativo η (ec. 1.34) o directamente la diferencia entre valores propios $\text{mín} \{\omega(\mathbf{k})_{n+1}^2\} - \text{máx} \{\omega(\mathbf{k})_n^2\}$ [4].

Yi et al. [31] añade una nueva restricción a la ecuación 1.67, con el fin de maximizar un band gap que quede centrado en una frecuencia objetivo ω_t :

$$g(\mathbf{k}) = \frac{\{\text{mín} \{\omega(\mathbf{k})_{n+1}\} - \text{máx} \{\omega(\mathbf{k})_n\}\}}{\omega_t} \quad (1.68)$$

En este trabajo se prefiere usar la declaración 1.67 para maximizar el band gap generado entre las bandas \mathbf{n} y $\mathbf{n} + 1$, escogiendo arbitrariamente a la banda n como aquella que se encuentra próxima a la primera resonancia local de la celda unitaria.

1.10. Aplicación de Metamodelos

En esta sección se abordará el uso de metamodelos o modelos de la superficie de respuesta (Response Surface Modeling), en el contexto de la predicción de bandas de frecuencia de un diseño periódico de vigas en dos dimensiones. La construcción de un metamodelo permite reproducir los resultados que se obtienen de simulaciones costosas, como las relaciones de dispersión ($\omega(k)$) de una onda elástica, las deformaciones de una estructura modelada a través de elementos finitos, o el desempeño de un proceso complejo que no cuenta con una forma explícita de su función de salida [32] [13]. A continuación se presenta la formulación matemática del Kriging, que es un tipo de modelo de regresión para estimar la respuesta de un punto en base a sus coordenadas espaciales.

1.10.1. Modelamiento por Kriging

El Kriging, también llamado proceso Gaussiano, es un método de interpolación que permite estimar la superficie de respuesta de una función, a través de una cantidad reducida de simulaciones, que son evaluadas sobre puntos generados de forma aleatoria (o pseudoaleatoria), dentro del espacio formado por los parámetros de la función. El modelo de Kriging consiste en la corrección de un modelo de regresión polinomial de bajo orden, utilizando una función de correlación espacial, que estima la similitud de dos puntos en el espacio de parámetros [13]. En la figura 27 se encuentra la superficie de respuesta obtenida a partir del modelo de Kriging para un sistema de 2 parámetros.

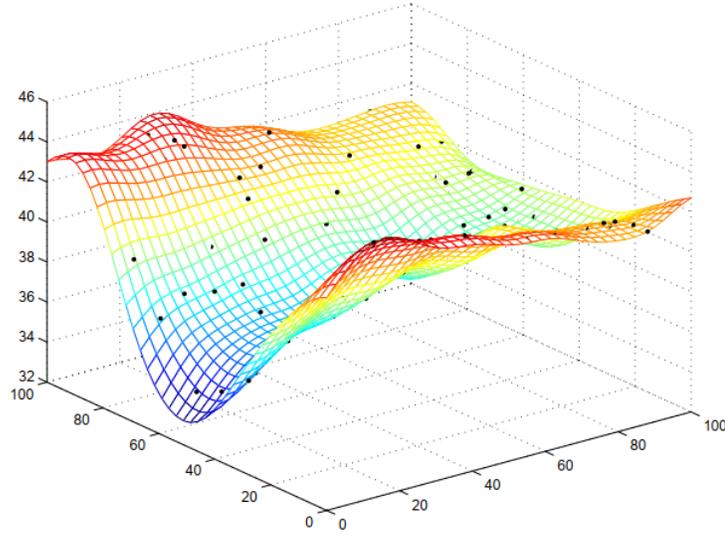


Figura 27: Modelo de Kriging para estimar la superficie de respuesta [12].

En la figura 27 los puntos de color negro corresponden al conjunto de dominio de diseño o diseño experimental. Expresado en forma general, se define al conjunto de N puntos de diseño como $S = \{\mathbf{s}^{(i)}\}$ con $i = \{1, \dots, N\}$, donde cada punto $\mathbf{s}^{(i)}$ cuenta con una dimensión de n -parámetros. De acuerdo con la definición del modelo de Kriging, la respuesta de una función vectorial $Y(\mathbf{s}) : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^r$ evaluada sobre el punto \mathbf{s} cumple con lo siguiente:

$$Y(\mathbf{s}) = \boldsymbol{\beta}F(\mathbf{s}) + Z(\mathbf{s}) \quad (1.69)$$

El primer término a la derecha de la igualdad representa a una base de p funciones polinomiales de la forma $f_m : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}$, que están siendo ponderadas por un coeficiente de regresión $\beta_{l,m}$ donde $l = \{1, \dots, r\}$ y $m = \{1, \dots, p\}$.

$$F(\mathbf{s}) = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{s}) \\ \vdots \\ f_p(\mathbf{s}) \end{bmatrix} \quad (1.70)$$

$$\boldsymbol{\beta} = \{\beta_{l,m}\} = \begin{bmatrix} \beta_{1,1} & \cdots & \beta_{1,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_{r,1} & \cdots & \beta_{r,p} \end{bmatrix} \quad (1.71)$$

El segundo término $Z(\mathbf{s})$ proviene de la suposición de una distribución gaussiana de media cero, que cumple con una función de covarianza dada por:

$$Z(\mathbf{s}) = \begin{bmatrix} z_1(\mathbf{s}) \\ \vdots \\ z_r(\mathbf{s}) \end{bmatrix} \quad (1.72)$$

$$E[z_l(\mathbf{s}^{(i)}), z_l(\mathbf{s}^{(j)})] = \sigma_l^2 \mathfrak{R}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{s}^{(i)}, \mathbf{s}^{(j)}) \quad (1.73)$$

Donde σ_l^2 es la varianza del l -ésimo componente de la respuesta $Y(\mathbf{s})$. El término $\mathfrak{R}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{s}^{(i)}, \mathbf{s}^{(j)})$ corresponde a un modelo de correlación que satisface las siguientes condiciones:

- Dos puntos ubicados en la misma posición tienen una correlación igual a la unidad.
- Dos puntos que se encuentran infinitamente separados tienen una correlación nula.

La forma general del modelo de correlación se enuncia en la ecuación 1.74, donde la función R_n de la pitatoria se denomina función de correlación o kernel.

$$\mathfrak{R}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{s}^{(i)}, \mathbf{s}^{(j)}) = \prod_{k=1}^n R_k(\theta_k, \mathbf{s}_n^{(i)} - \mathbf{s}_n^{(j)}) \quad (1.74)$$

Las funciones de correlación son dependientes de distancia euclidiana de los puntos comparados, donde el subíndice n indica la n -ésima componente (o parámetro) del punto \mathbf{s} . En el anexo 6.1 se encuentran algunas funciones de correlación básicas. La forma más habitual de la función de correlación es la función exponencial generalizada:

$$\mathfrak{R} = \prod_{k=1}^n \exp\left[-\theta_k \left(\mathbf{s}_k^{(i)} - \mathbf{s}_k^{(j)}\right)^\lambda\right] = \exp\left[\sum_{k=1}^n -\theta_k \left(\mathbf{s}_k^{(i)} - \mathbf{s}_k^{(j)}\right)^\lambda\right] \quad (1.75)$$

Donde $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \dots, \theta_n]^\top$ y λ son parámetros desconocidos del modelo que deben ser ajustados. Además, λ debe pertenecer al intervalo $[1, 2]$. Se debe destacar que el ponderador θ_k indica la importancia del k -ésimo parámetro, es decir, mientras mayor sea θ_k , menor es la influencia del parámetro k . Por otro lado, λ determina si la función es suave. Por ejemplo, cuando $\lambda = 2$ la función es infinitamente diferenciable (se vuelve una función gaussiana). En cambio, cuando $\lambda = 1$, se vuelve una función lineal en distancias cercanas a 0. En las figuras 28a y 28b se observa el efecto de los parámetros θ_k y λ respectivamente, sobre un problema unidimensional.

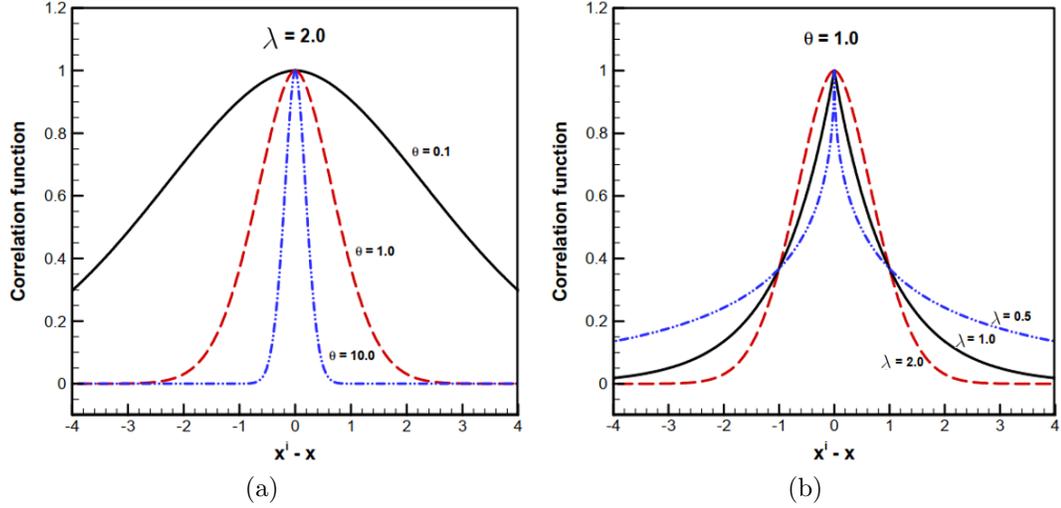


Figura 28: Función de correlación exponencial generalizada evaluada con diferentes hiperparámetros [13].

Para determinar los parámetros θ_k y λ óptimos, de acuerdo con [12] se debe encontrar el estimador de máxima verosimilitud:

$$\min_{\boldsymbol{\theta}} \left\{ \psi(\boldsymbol{\theta}) = |\mathbf{R}|^{\frac{1}{N}} \sigma \right\} \quad (1.76)$$

donde $|\mathbf{R}|$ corresponde al determinante de la matriz de correlación \mathbf{R} , cuyos componentes se obtienen a partir de la ecuación 1.74:

$$\mathbf{R} = \mathfrak{R}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{s}^{(i)}, \mathbf{s}^{(j)}) = \begin{bmatrix} R(\mathbf{s}^{(1)}, \mathbf{s}^{(1)}) & R(\mathbf{s}^{(1)}, \mathbf{s}^{(2)}) & \dots & R(\mathbf{s}^{(1)}, \mathbf{s}^{(N)}) \\ R(\mathbf{s}^{(2)}, \mathbf{s}^{(1)}) & R(\mathbf{s}^{(2)}, \mathbf{s}^{(2)}) & \dots & R(\mathbf{s}^{(2)}, \mathbf{s}^{(N)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R(\mathbf{s}^{(N)}, \mathbf{s}^{(1)}) & R(\mathbf{s}^{(N)}, \mathbf{s}^{(2)}) & \dots & R(\mathbf{s}^{(N)}, \mathbf{s}^{(N)}) \end{bmatrix} \quad (1.77)$$

Junto con la matriz de correlación \mathbf{R} , también se define el vector de correlación \mathbf{r} , como aquel que se obtiene al evaluar un punto en una ubicación nueva:

$$\mathbf{r} = \mathfrak{R}(\boldsymbol{\theta}, \mathbf{s}^{(i)}, \mathbf{s}) = \begin{bmatrix} R(\mathbf{s}^{(1)}, \mathbf{s}) \\ R(\mathbf{s}^{(2)}, \mathbf{s}) \\ \vdots \\ R(\mathbf{s}^{(N)}, \mathbf{s}) \end{bmatrix} \quad (1.78)$$

Luego, definiendo a \mathbf{F} como la matriz de evaluaciones de las funciones de regresión polinomial de los N puntos de diseño, la matriz de parámetros de regresión $\boldsymbol{\beta}$ se puede calcular como:

$$\boldsymbol{\beta}^* = (\mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \mathbf{F})^{-1} \mathbf{F}^T \mathbf{R}^{-1} \boldsymbol{\Lambda} \quad (1.79)$$

$$\mathbf{F} = \{F_{i,m}\} = \begin{bmatrix} f_1(\mathbf{s}^{(1)}) & f_2(\mathbf{s}^{(1)}) & \dots & f_p(\mathbf{s}^{(1)}) \\ f_1(\mathbf{s}^{(2)}) & f_2(\mathbf{s}^{(2)}) & \dots & f_p(\mathbf{s}^{(2)}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(\mathbf{s}^{(N)}) & f_2(\mathbf{s}^{(N)}) & \dots & f_p(\mathbf{s}^{(N)}) \end{bmatrix} \quad \text{para } m = \{1, \dots, p\} \quad (1.80)$$

Donde $\boldsymbol{\beta}^{*\text{T}} = [\beta_{l,1}, \beta_{l,2}, \dots, \beta_{l,p}]$ con $l = \{1, \dots, r\}$ son las filas de la matriz de coeficientes de regresión $\boldsymbol{\beta}$, y $\boldsymbol{\Lambda} = [\mathbf{s}^{(1)}, \mathbf{s}^{(2)}, \dots, \mathbf{s}^{(N)}]^\text{T}$ es el vector que contiene los puntos de diseño. La varianza asociada σ^2 está dada por:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} (\boldsymbol{\Lambda} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}^*)^\text{T} \mathbf{R}^{-1} (\boldsymbol{\Lambda} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}^*) \quad (1.81)$$

Por tanto, de acuerdo con [12], el mejor predictor lineal insesgado de una ubicación nueva se puede obtener de la siguiente manera:

$$\hat{y}_l(\mathbf{s}) = \mathbf{f}(\mathbf{s}) \boldsymbol{\beta}^* + \mathbf{r}(\mathbf{s})^\text{T} \mathbf{R}^{-1} (\boldsymbol{\Lambda} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}^*) \quad (1.82)$$

En la ecuación 1.82, cada una de las matrices y vectores deberán ser recalculados para estimar la componente l -ésima de la respuesta $\hat{\mathbf{Y}} = [\hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_r]^\text{T}$. Para determinar los parámetros y coeficientes del modelo, en el presente estudio se utiliza el toolbox de Matlab DACE, desarrollado por Sondergaard et al. [12].

1.10.2. Búsqueda de óptimos en Metamodelos (Searching Surrogate Models)

La función objetivo del problema de maximización del band gap planteado en la ecuación 1.67 puede ser estimada a través de un modelo de Kriging:

$$\begin{aligned} \text{máx} \quad & \{\hat{y}(\mathbf{x}) = \Delta\omega\} \\ \text{s.a} \quad & \mathbf{x}_{lb} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{ub} \end{aligned} \quad (1.83)$$

Donde \mathbf{x}_{lb} y \mathbf{x}_{ub} son los límites inferiores y superiores de las variables de diseño. Es posible mejorar la predicción del modelo añadiendo nuevos puntos a la muestra de datos. A este procedimiento se le denomina refinamiento de la muestra (sample-point-refinement) y a las reglas que se usan para determinar nuevos puntos, criterio de llenado (infill criteria) [15].

El criterio utilizado en este trabajo consiste en resolver el problema de optimización planteado en 1.83 mediante un algoritmo de búsqueda de óptimos locales de descenso del gradiente. Las variables de diseño óptimas encontradas son evaluadas numéricamente a través del modelo de elementos finitos para encontrar su respectivo valor real. Si el error que existe entre ellos se encuentra por debajo de un límite, se puede dar por terminada a la rutina de optimización. En el caso contrario, los puntos evaluados son añadidos a la muestra y el modelo de Kriging es reconstruido. Este criterio de muestreo se denomina Searching Surrogate Model (SSM) y es aplicable a cualquier tipo de metamodelo, obteniendo resultados favorables para la exploración local de una región de interés en el espacio de diseño [15].

2. Formulación

En esta sección se detalla la formulación del problema de optimización para producir una estructura que maximice la supresión de vibraciones. Se entregará una descripción de la geometría de la celda unitaria a analizar y el dominio de diseño explorado. También se abordarán los aspectos relevantes del proceso de modelamiento a través de elementos finitos y de la generación del modelo sustitutivo.

2.1. Geometría de la Celda Unitaria

Se escoge un diseño que permita estudiar las resonancias locales de un cristal fonónico e identificar la presencia de band gaps. En este estudio, el cristal fonónico se modela como un panel bidimensional, conformado por una matriz y resonadores internos. La celda unitaria cuenta con una geometría cuadrada y en su interior se añaden vigas en voladizo, obteniendo un sistema tipo voladizo en masa (cantilever-in-mass system). El esquema de la celda unitaria se presenta en la figura 29. Las etiquetas sobre el esquema indican Los parámetros geométricos de la celda. Por otro lado, los parámetros de material dependen directamente de la composición de la celda, influyendo en la rigidez y las resonancias internas que puedan ocurrir en la estructura.

En la figura 29 se puede observar que la celda unitaria se descompone en otras cuatro celdas interiores, cada una formada por un marco cuadrado de vigas unidas rígidamente, y por un conjunto de ocho voladizos organizados en pares, que se encuentran empotrados en las esquinas del marco. De esta forma, cada voladizo tiene una inclinación característica respecto de las vigas horizontales y verticales que lo rodean. La longitud del voladizo también es un parámetro propio de éste, junto con su espesor, su densidad y su rigidez. Además, sobre el extremo de cada voladizo se delimita un receptáculo sobre el cual es posible añadir masas al sistema. Por lo tanto, la celda unitaria queda completamente definida cuando los siguientes parámetros son conocidos:

- La longitud de la celda unitaria L_c . Debido a que la geometría es cuadrada, la periodicidad horizontal y vertical son equivalentes, es decir, $L_x = L_y = L_c$.
- Las longitudes $\{L_v^{(i)}\}$, inclinaciones $\{\theta^{(i)}\}$ y masas suspendidas $\{m_R^{(i)}\}$ con $i = \{1, \dots, 32\}$ de los 32 voladizos.
- Las propiedades de material como la densidad $\{\rho^{(j)}\}$, el módulo de elasticidad $\{E^{(j)}\}$ y la sección transversal $\{A^{(j)}\}$, con $j = \{1, \dots, 44\}$, de los 32 voladizos y los 12 bordes.

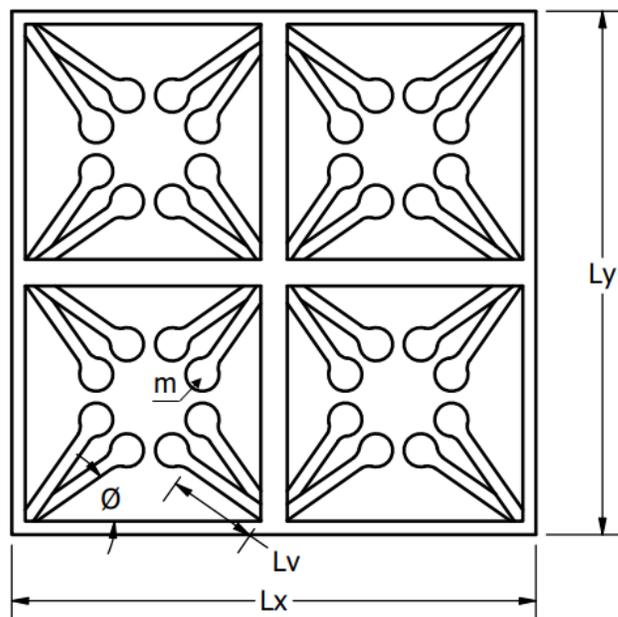


Figura 29: Estructura parametrizada de la celda unitaria.

2.2. Imposición de Simetría

En la sección de antecedentes se discutió la importancia de que existan simetrías internas en la celda unitaria, con el objetivo de enlazar sus bordes contrapuestos a través de la ley de Bloch, reduciendo así el cálculo de las bandas de frecuencias a la zona irreductible de Brillouin.

Con el fin de poder aplicar la ley de periodicidad, se imponen sobre la celda unitaria simetrías con respecto a un eje vertical, un eje horizontal y los ejes diagonales, que se intersectan en el centro de la celda, de modo que las propiedades geométricas y de material pertenecientes a alguna de las secciones triangulares restantes, es suficiente para recrear la celda completa, tal como se grafica en la figura 30. Esta corresponde a la zona irreductible de Brillouin o de máxima simetría.

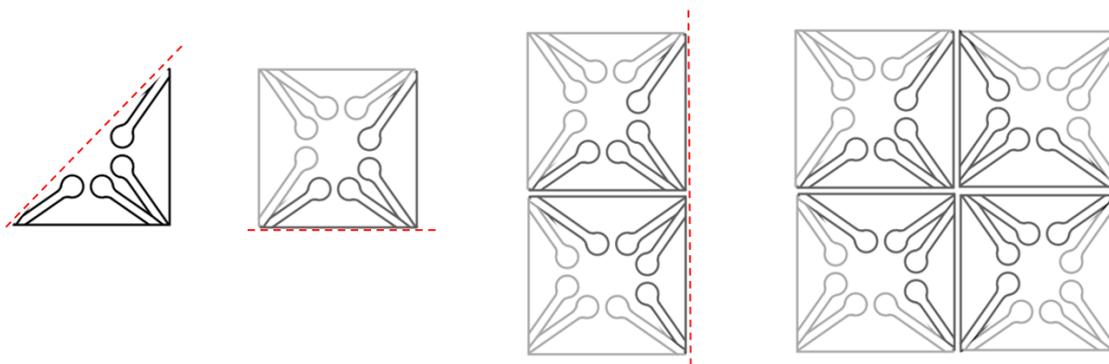


Figura 30: Simetrías internas de la celda.

2.3. Dominio de Diseño

A continuación se detalla el dominio de diseño sobre el cual se efectúa la optimización topológica de la celda unitaria.

Los parámetros geométricos determinan el tamaño de la celda, la longitud e inclinación de los voladizos, y la magnitud de las masas agregadas en los extremos libres del voladizo. De forma arbitraria se impone que la longitud de la celda es de $L_c = 150[mm]$, de modo que entre dos uniones rígidas entre vigas existirá una longitud de $L = 75[mm]$. Por otro lado, se impone que la longitud del voladizo L_v pueda variar entre un tercio y un medio de la longitud L del marco: $L_v \in [\frac{1}{3}L, \frac{1}{2}L] = [25, 37.5][mm]$. El ángulo entre los voladizos y el marco también se acota al rango $\theta \in [10, 35^\circ]$. Finalmente, las masas añadidas a los extremos del voladizo se evalúan entre el rango $[0, 0,0196][kg]$. Esta elección se realiza considerando como límite superior a la masa de un cubo de $1[cm^3]$ de tungsteno. Se debe notar que dentro de la zona de máxima simetría solo se deben definir las propiedades geométricas de cuatro voladizos.

Por otra parte, las propiedades de material se escogen en función de dos alternativas: aluminio o tungsteno. Las propiedades de ambos materiales se reportan en la tabla.. hacer tablita de materiales. Como parte de los parámetros de material, se incluye sección transversal del elemento evaluado. Se consideran dos diámetros posibles: $d_1 = 4[mm]$ y $d_1 = 8[mm]$. De este modo, un punto de diseño se define a través de la siguiente combinación de parámetros:

$$\begin{aligned} \chi^{(G)} &= \left(L_v^{(1)}, L_v^{(2)}, L_v^{(3)}, L_v^{(4)}, \theta_v^{(1)}, \theta_v^{(2)}, \theta_v^{(3)}, \theta_v^{(4)}, m_R^{(1)}, m_R^{(2)}, m_R^{(3)}, m_R^{(4)} \right) \\ \chi^{(M)} &= \left(\rho_{Al,W}^{(1)}, E_{Al,W}^{(1)}, \rho_{Al,W}^{(2)}, E_{Al,W}^{(2)}, \rho_{Al,W}^{(3)}, E_{Al,W}^{(3)}, \rho_{Al,W}^{(4)}, E_{Al,W}^{(4)}, \rho_{Al,W}^{(5)}, E_{Al,W}^{(5)}, \right. \\ &\quad \left. \rho_{Al,W}^{(6)}, E_{Al,W}^{(6)}, A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}, A^{(4)}, A^{(5)}, A^{(6)} \right) \end{aligned}$$

Donde el superíndice (i) indica al elemento al que se vincula la propiedad y $\chi^{(G)}$ y $\chi^{(M)}$ son los vectores que detonan los parámetros geométricos y de material respectivamente. La densidad y el módulo de elasticidad no pueden ser combinados por separado, ya que son intrínsecos del material elegido.

Cuadro 1: Propiedades mecánicas del Aluminio 6061 y Tungsteno.

Propiedad	Aluminio	Tungsteno
Módulo de elasticidad E	68.9[GPa]	411,0[GPa]
Densidad ρ	2700 $\frac{kg}{m^3}$	19300 $\frac{kg}{m^3}$
Coefficiente de Poisson ν	0.33	0.28

2.4. Modelo de Elementos Lineales

Indirectamente se ha caracterizado a la celda unitaria a través de las secciones que se ubican entre las uniones de su estructura, asignando una combinación de propiedades a cada una. De modo que cada sección se modela como un elemento finito tipo viga, usando las ecuaciones 1.62 y 1.63. Luego, es posible determinar las matrices globales ensambladas de

rigidez $\mathbf{K}(\boldsymbol{\chi})$ y de masas $\mathbf{M}(\boldsymbol{\chi})$, que dependen directamente de la combinación de parámetros evaluada $\boldsymbol{\chi}$. En el caso particular de los elementos en voladizo, la adición de masas sobre sus extremos se modela como masas puntuales indeformables, de modo que la matriz local de masas de un elemento voladizo como el de la figura 31 se obtendrá como:

$$\mathbf{M}_v = \frac{\rho_v A_v L_v}{410} \begin{bmatrix} \mathbf{u}_i & \mathbf{v}_i & \theta_i & \mathbf{u}_j & \mathbf{v}_j & \theta_j \\ 140 + m_R & 0 & 0 & 70 & 0 & 0 \\ 0 & 156 + m_R & 22L_v & 0 & 54 & -13L_v \\ 0 & 22L_v & 4L_v^2 & 0 & 13L_v & -3L_v^2 \\ 70 & 0 & 0 & 140 & 0 & 0 \\ 0 & 54 & 13L_v & 0 & 156 & -22L_v \\ 0 & -13L_v & -3L_v^2 & 0 & -22L_v & 4L_v^2 \end{bmatrix} \quad (2.1)$$

El movimiento de las masas suspendidas implica que el elemento en voladizo se deflecta. Es por ello que para describir los modos de vibración de la estructura, es necesario subdividir sus elementos, permitiendo así analizar desplazamientos nodales intermedios. Esto se conoce como refinamiento de malla.

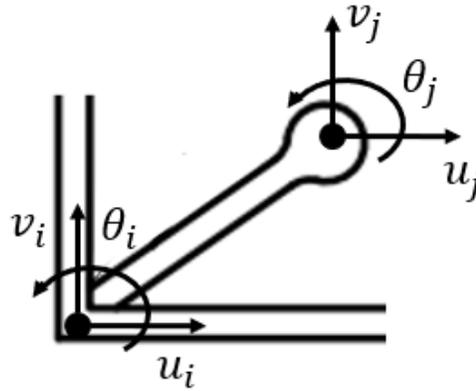


Figura 31: Elemento viga en voladizo

2.5. Imposición de Periodicidad

El panel conformado por la celda unitaria se modelará como una estructura periódica infinita. Para esto, se aplican las condiciones de borde del teorema de Bloch en su forma matricial para estructuras de dos dimensiones (ec. 1.30), evaluando vectores de onda que se encuentren en el perímetro de la zona de máxima simetría. Luego, las frecuencias naturales ω y los modos fundamentales de vibración $\tilde{\mathbf{u}}$ se obtienen resolviendo la siguiente ecuación de valores y vectores propios:

$$\mathbf{P}_{(k_x, k_y)}^H (\mathbf{K}(\boldsymbol{\chi}) - \omega^2 \mathbf{M}(\boldsymbol{\chi})) \mathbf{P}_{(k_x, k_y)} \tilde{\mathbf{u}} = 0 \quad (2.2)$$

2.6. Formulación del problema de Optimización

La solución de la ecuación 2.2 entrega un conjunto de frecuencias naturales $\omega(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k})$ y vectores modales $\tilde{\mathbf{u}}(\boldsymbol{\chi}, \mathbf{k})$ que dependen del punto de diseño $\boldsymbol{\chi}$ y del vector de onda \mathbf{k} . Man-

teniendo fijo el punto de diseño $\boldsymbol{\chi}$, por cada vector de onda \mathbf{k} se obtiene una lista de valores propios, que al ser ordenada de forma ascendente, permite hacer el seguimiento de los valores propios, observando una posición específica de la lista, en función de las componentes del vector de onda. De esta forma, el término $\omega_n(\mathbf{k})$ indica la evolución de la frecuencia natural, asociada al valor propio ubicado en la n -ésima posición del listado. A partir de la ecuación 1.32, un band gap ($\Delta\omega$) se identifica cuando la diferencia entre dos bandas adyacentes es positiva. De acuerdo con esta definición, la declaración del problema de optimización para la celda unitaria, es la siguiente:

$$\begin{aligned}
& \text{máx} \quad \{ \Delta\omega = \text{mín} \{ \omega(\mathbf{k})_{n+1} \} - \text{máx} \{ \omega(\mathbf{k})_n \} \} \\
& \text{s.a} \quad (\bar{\mathbf{K}}(\mathbf{k}) - \omega^2 \bar{\mathbf{M}}(\mathbf{k})) \mathbf{u} = 0 \quad \forall \mathbf{k} \in [\Gamma, \mathbf{X}, \mathbf{M}, \Gamma] \\
& \quad \frac{1}{3} L_c \leq L_v^{(i)} \leq \frac{1}{2} L_c \quad i = [1, \dots, 4]; L_c = 75[mm] \\
& \quad \theta_{lb} \leq \theta^{(i)} \leq \theta_{ub} \quad \theta_{lb} = 10^\circ; \theta_{ub} = 35^\circ \\
& \quad 0 \leq m_R^{(i)} \leq m_{ub} \quad m_{ub} = 0,0196[kg] \\
& \quad A_{lb} \leq A^{(j)} \leq A_{ub} \quad j = [1, \dots, 6]; \\
& \quad A_{lb} = A(d = 4[mm]); A_{ub} = A(d = 8[mm]) \\
& \quad 0 \leq \mathbf{x}_{(M)}^{(j)} \leq 1
\end{aligned} \tag{2.3}$$

Donde los subíndices lb y ub indican los límites inferiores y superiores de la propiedad. L_v , θ , m_R indican respectivamente la longitud, la inclinación y las masas añadidas de los elementos en voladizo. Por otro lado, A indica las secciones transversales de cada viga, incluyendo vigas conectadas y vigas en voladizo, y $\mathbf{x}_{(M)}$ indica el tipo de material de la estructura, de manera que la densidad ρ y el módulo de elasticidad E se extraen interpolando entre las propiedades del aluminio y el tungsteno:

$$\rho = (\rho_W - \rho_{Al}) \mathbf{x}_{(M)} + \rho_{Al} \tag{2.4}$$

$$E = (E_W - E_{Al}) \mathbf{x}_{(M)} + E_{Al} \tag{2.5}$$

Donde los subíndices Al y W denotan las propiedades del aluminio y el tungsteno, respectivamente.

3. Metodología

El desarrollo de este trabajo se puede organizar en tres etapas. La primera corresponde a generación de la muestra de datos experimentales, a través de la simulación de la estructura periódica compuesta por resonadores. La segunda etapa corresponde a la preparación de un modelo predictivo para buscar en él puntos locales óptimos de diseño; Finalmente, se valida el diseño de la celda unitaria a través de la simulación de una estructura finita. La descripción de cada uno de estos procesos se detalla a continuación. Además, en la figuras 32 y 33 se incluye el diagrama de flujo de las actividades detalladas.

3.1. Generación de Muestras y Simulación

En primera instancia se programa en Matlab un modelo de elementos finitos tipo viga representativo del diseño de la celda unitaria estudiada, con el cual sea posible calcular su estructura de bandas, de acuerdo con la formulación establecida en el capítulo 3. El procedimiento adoptado para obtener los diagramas de banda es el siguiente:

1. Seleccionar los parámetros de diseño (Σ) de la celda primitiva con resonadores de voladizo.
2. Aplicar una malla de elementos finitos tipo viga para discretizar el modelo y obtener las matrices de rigidez (\mathbf{K}) y masas (\mathbf{M}) de la estructura.
3. Aplicar el teorema de Bloch sobre los bordes de la celda y obtener las matrices de rigidez ($\tilde{\mathbf{K}}$) y masas ($\tilde{\mathbf{M}}$) en dimensiones reducidas.
4. Fijar las constantes de fase para restringir las componentes del vector de onda (k_1, k_2) al perímetro de la zona irreductible de Brillouin y resolver la ecuación de valores y vectores propios.
5. Comprobar si las relaciones dispersión de la onda $\omega(\Sigma, \mathbf{k})$ están asociadas a un modo local de la estructura

Se consideran distintos refinamientos (subdivisiones) del modelo para el paso 2. y, en base al tiempo de procesamiento y a la precisión del modelo, se selecciona el refinamiento que mejor se adapte a las condiciones del problema. Para comparar la exactitud de cada refinamiento, se usa de referencia el cambio en la amplitud en frecuencias de un band gap detectado en el diagrama de bandas.

Posteriormente, se utiliza el refinamiento de malla seleccionado para efectuar la simulación de múltiples puntos de diseño, y generar una muestra de datos. Con el fin de obtener una muestra representativa, se utiliza la técnica de muestreo Latin Hypercube Sampling (LHS) [15], que consiste en evaluar puntos de manera aleatoria con una distribución uniforme al interior del dominio de diseño. El parámetro de salida, o respuesta al punto de diseño, corresponde a la distancia en frecuencias (ec. 1.32), que se produce entre dos bandas adyacentes a la primera frecuencia de resonancia local encontrada.

Este trabajo pretende estudiar los band gaps que se produzcan a causa de resonancias internas de la estructura. Por lo tanto, a partir del modelo de elementos finitos, se identifican las frecuencias naturales $\omega(\Sigma, \mathbf{k})$ asociadas a los modos de vibración locales de las masas suspendidas (paso (5)), es decir, modos en los que los desplazamientos nodales ($\tilde{\mathbf{u}}$) de la estructura son nulos, excepto por los nodos ubicados en los elementos en voladizo. Este proceso se realiza para cada punto de diseño. Una vez que se ha identificada la frecuencia de resonancia local, se calcula la distancia que existe entre las bandas adyacentes a ella.

El resultado final de esta etapa permite asociar a los parámetros de entrada, que corresponden a los propiedades de material y de geometría discutidos en la sección 2, con un valor de salida, que representa al band gap fonónico desarrollado por la estructura.

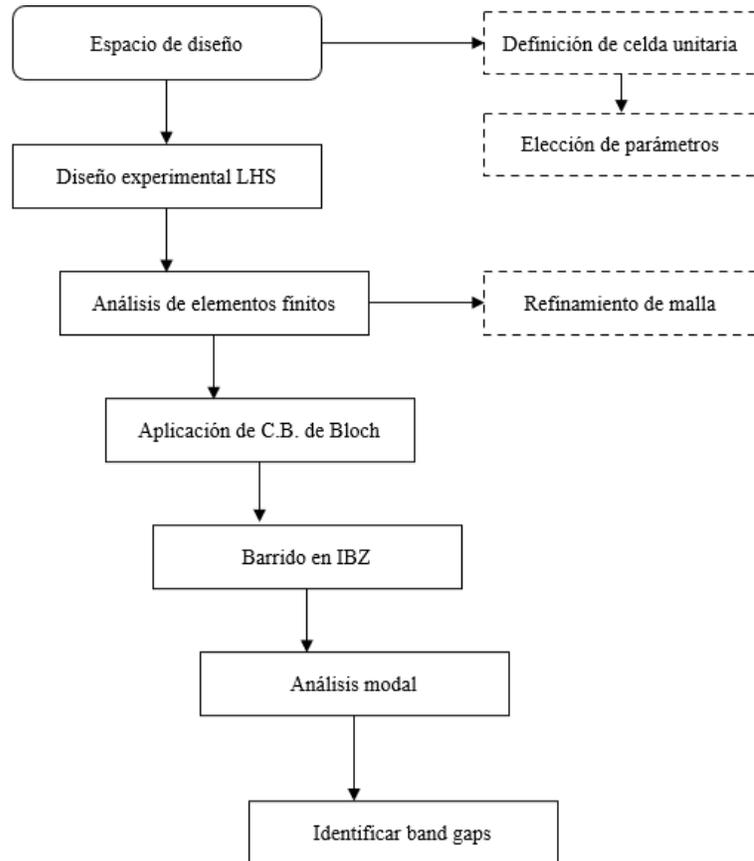


Figura 32: Diagrama de flujo para la etapa de generación de muestras y simulación.

3.2. Construcción del Metamodelo de Kriging

A partir de la muestra generada, se utiliza el toolbox de Matlab DACE, desarrollado por Sondergaard et al [15], para generar un modelo de estimación directa de las distancias entre bandas adyacentes a la resonancia local, y en consecuencia, que sustituya el modelo de elementos finitos y análisis modal desarrollado anteriormente. El modelo predictivo utilizado en este trabajo corresponde al metamodelo de Kriging.

En primera instancia se utiliza una porción del 70% de los datos de muestra para generar metamodelos de Kriging en base a diferentes combinaciones de modelos de regresión y funciones de correlación, disponibles en el anexo 6.1. El 30% restante se evalúa sobre los modelos generados, y se compara la predicción entregada con el valor real calculado, a través del índice de aciertos (Index of Agreement, *IoA*), con el objetivo de escoger a uno de ellos. Posteriormente, se aplica la metodología de refinamiento bi-level, reportada por ZH Han & KS Zhang [15], quienes proponen a este método como una alternativa para resolver problemas de optimización basados en metamodelos.

El método bi-level consiste en mejorar la precisión del modelo sustitutivo a través de actualizaciones en la muestra de datos. Una vez que el modelo de Kriging es generado, se procede a buscar los mínimos (o máximos) locales del modelo a través de un algoritmo de optimización por gradiente. Los puntos encontrados son evaluados numéricamente en la simulación de elementos finitos y luego son añadidos a la muestra de datos. La muestra con datos nuevos es usada para generar un nuevo metamodelo de Kriging, para luego repetir la búsqueda de mínimos locales. Este procedimiento se repite iterativamente hasta que el error entre el punto óptimo del metamodelo y su valor real calculado a través de la simulación de elementos finitos sea inferior a un límite. Esta técnica de actualización de la muestra con puntos óptimos locales se denomina

3.3. Validación

Una vez que el modelo de Kriging ha sido refinado hasta su convergencia, el punto mínimo (o máximo) encontrado puede considerarse como una aproximación del óptimo global del problema, por tanto, genera el band gap de mayor rango encontrado. A partir del punto óptimo, se deducen los parámetros de diseño de la celda, que se utiliza para generar un panel periódico bidimensional con una cantidad finita de celdas unitarias.

Para corroborar la presencia de un rango de supresión de vibraciones, se simula la función de respuestas en frecuencias entre dos puntos extremos del panel que se ubican en las direcciones comprendidas por la zona irreductible de Brillouin.

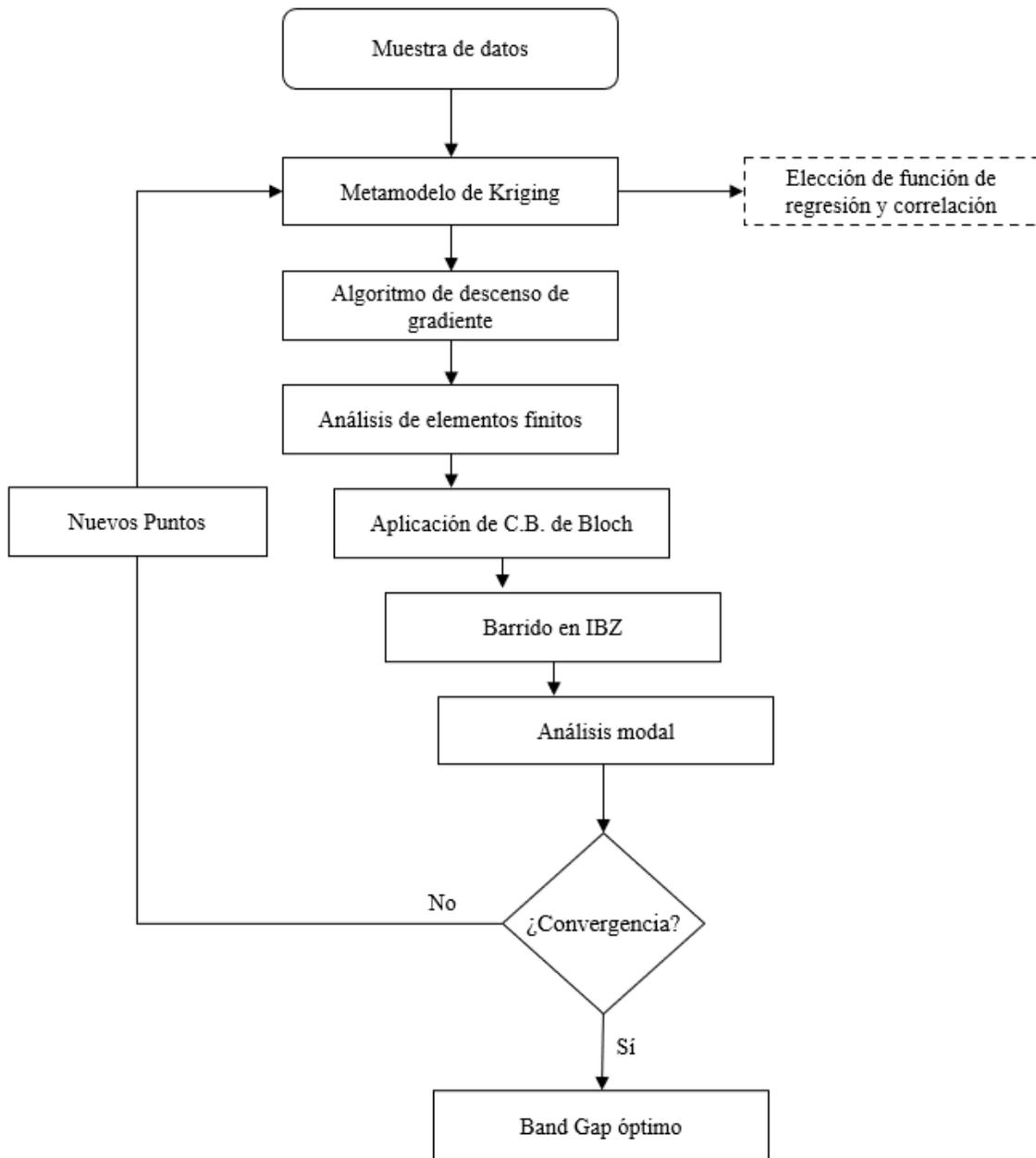


Figura 33: Diagrama de flujo para la metodología de optimización.

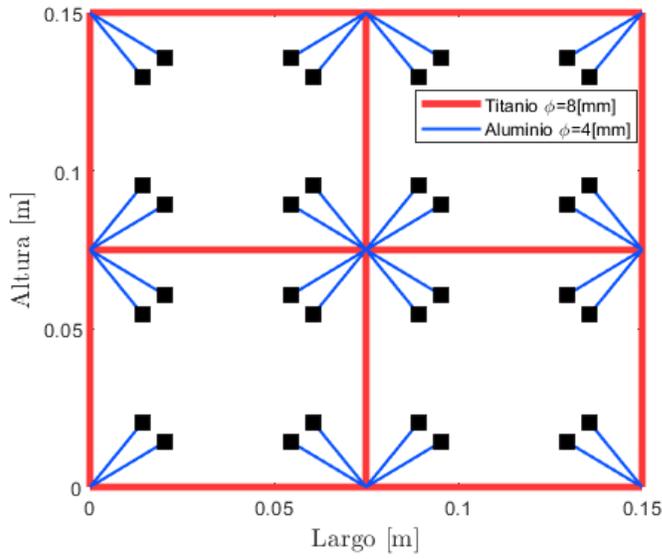
4. Resultados

4.1. Refinamiento de Malla

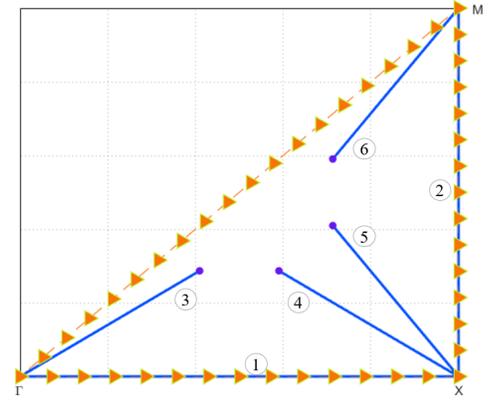
Para este apartado, se considera realizar el análisis de refinamiento del modelo de elementos finitos implementado sobre la estructura de una celda unitaria. A modo de referencia, se examina el cambio en los diagramas de bandas obtenidos para un diseño en particular, en función de la cantidad de subdivisiones de elementos que conforman su estructura. En la figura 34 se encuentra el modelo utilizado para la celda unitaria, donde los elementos de igual color comparten las mismas propiedades de material. Los parámetros de material y geométricos se resumen en la tabla 2. Para el cálculo de los diagramas de banda se utiliza el método de barrido de vectores de onda $\omega(\mathbf{k})$, el cual se encuentra descrito en la sección 1.5. Las condiciones de refinamiento evaluadas son las siguientes: (a) Vigas sin subdivisiones; (b) 2 subdivisiones por viga; (c) 4 subdivisiones por viga; (d) 10 subdivisiones por viga.

Cuadro 2: Parámetros de diseño evaluados sobre la celda unitaria.

	Elemento					
	1	2	3	4	5	6
Longitud L	75 [mm]	75 [mm]	37,5 [mm]	37,5 [mm]	37,5 [mm]	37,5 [mm]
Inclinación θ	0°	45°	35°	145°	125°	235°
Masa m_R	-	-	0,01 [kg]	0,01 [kg]	0,01 [kg]	0,01 [kg]
Diámetro ϕ	8 [mm]	8 [mm]	4 [mm]	4 [mm]	4 [mm]	4 [mm]
Densidad ρ	19300 [$\frac{kg}{m^3}$]	19300 [$\frac{kg}{m^3}$]	2700 [$\frac{kg}{m^3}$]			
Módulo de Young E	411,0 [GPa]	411,0 [GPa]	68,9 [GPa]	68,9 [GPa]	68,9 [GPa]	68,9 [GPa]

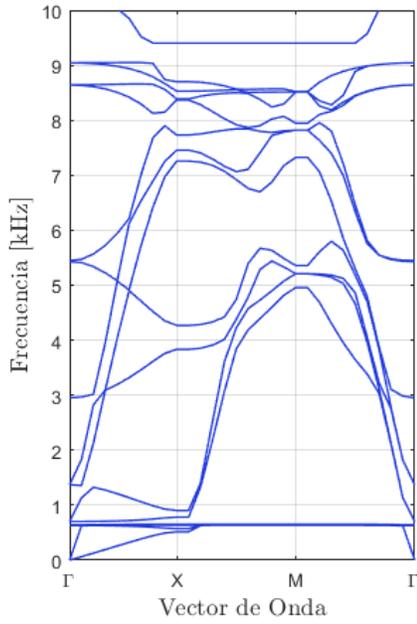


(a) Geometría de la celda

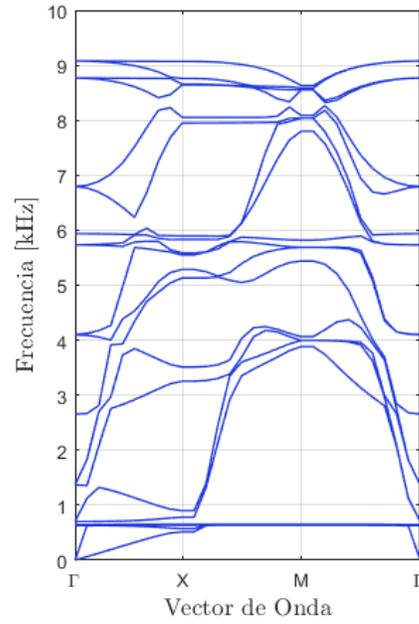


(b) Zona irreductible de Brillouin

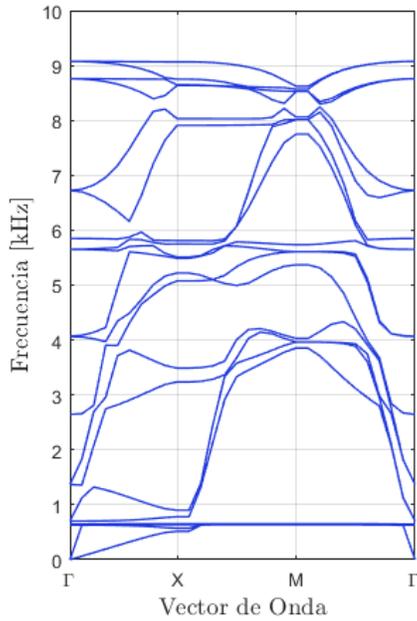
Figura 34: Modelo de celda unitaria.



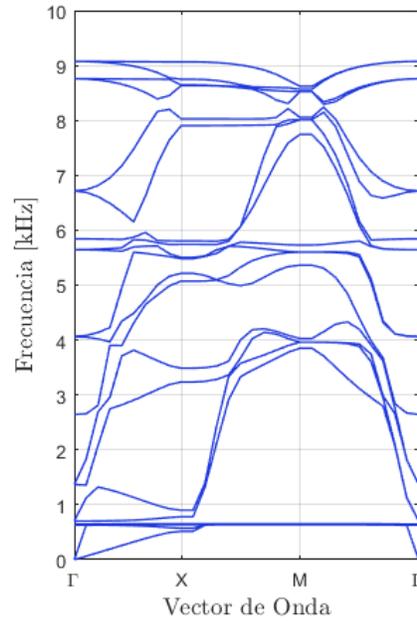
(a) Sin subdivisiones



(b) 2 subdivisiones



(c) 4 subdivisiones



(d) 10 subdivisiones

Figura 34: Diagrama de bandas obtenido a través de distintos refinamientos de malla.

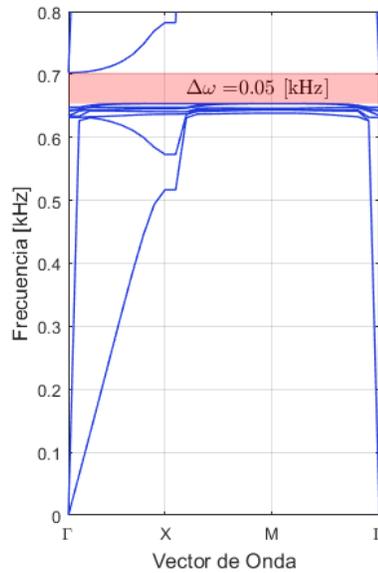


Figura 35: Band gap sobre la banda $n = 8$. Acercamiento sobre malla (b).

La tabla 3 resume los tiempos de procesamiento de cada refinamiento y la cantidad de valores propios (y modos normales) encontrados para cada uno. Además, se compara la magnitud de un band gap identificado sobre la banda $n = 8$, generado entre el rango $650[Hz]$ - $700[Hz]$. La figura 35 muestra un acercamiento a la zona sobre el diagrama obtenido usando el refinamiento (b) de 2 subdivisiones.

Cuadro 3: Desempeño del modelo de elementos finitos empleando refinamiento distintos.

Refinamiento	Tiempo	Cantidad de Valores Propios < 10 [kHz]	Cantidad total de valores propios	Band Gap banda $n = 9$
Sin refinamiento	9,2 [s]	67	108	49,93 [Hz]
2 subdivisiones	17,52 [s]	78	228	48,93 [Hz]
4 subdivisiones	87,02 [s]	78	468	48,92 [Hz]
10 subdivisiones	1202,71 [s]	78	1188	48,92 [Hz]

4.2. Optimización del Dominio de Diseño

En este apartado se reporta la resolución del problema de maximización del band gap, utilizando el método de optimización mediante metamodelos de Kriging. Las variables de diseño consideradas se encuentra detallada en el capítulo 3.

4.2.1. Muestra de Datos Experimentales

Se selecciona el refinamiento de malla (b), de modo que cada elemento definido por la unión rígida de vigas es dividido en dos. Los puntos de diseño se escogen de acuerdo con el ensayo LHS.

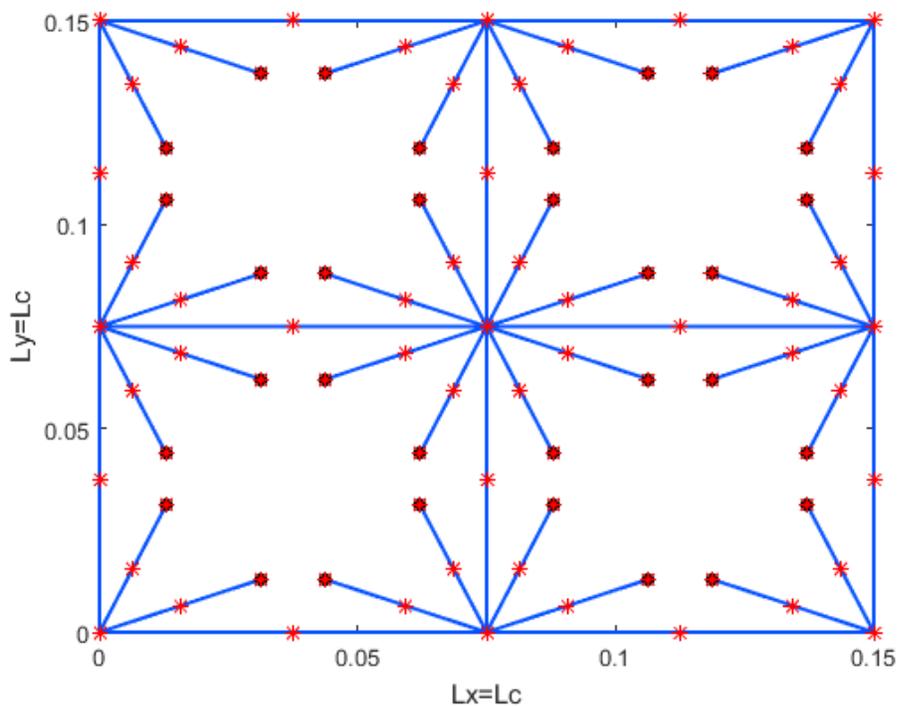


Figura 36: Modelo de elementos finitos de la celda unitaria de estudio genérica.

4.2.2. Entrenamiento del Metamodelo de Kriging

Se utiliza el 70% de una muestra de 1000 datos para construir 9 modelos predictivos de Kriging creados a partir de la combinación de distintas funciones de regresión (constante, lineal y cuadrática) y funciones de correlación (exponencial, exponencial generalizada y gaussiana). El porcentaje restante se usa para construir los variogramas de la figura 38. La métricas IoA de cada modelo generado se reporta en la tabla 4.

En la figura 37 se muestra la convergencia del algoritmo de actualización del modelo predictivo (ver sección 3.2), aplicado a un metamodelo de Kriging de segundo orden con una función de correlación exponencial generalizada. En la tabla 5 se registran los valores máximos encontrados para el band gap en cada generación, junto con los valores promediados del error asociado al modelo.

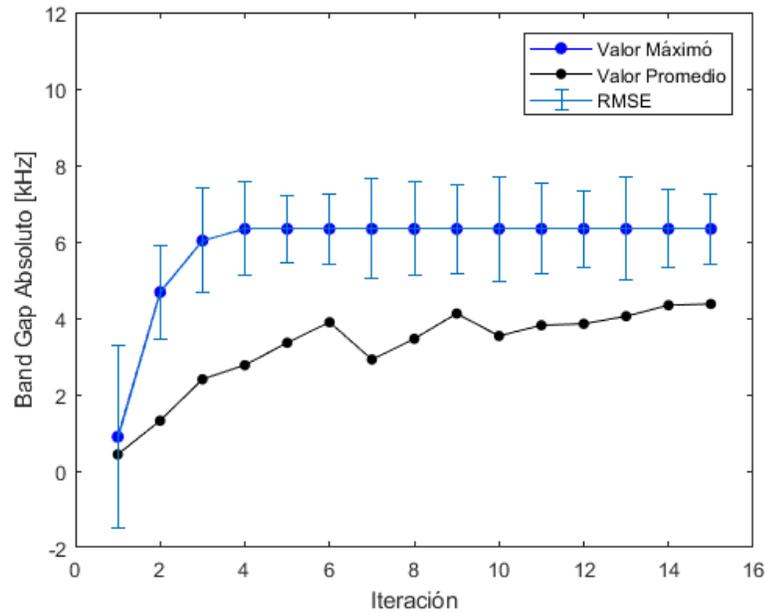
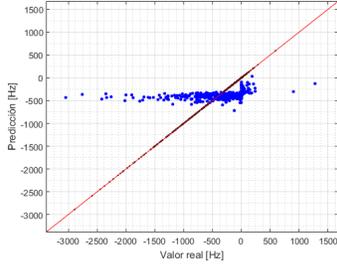


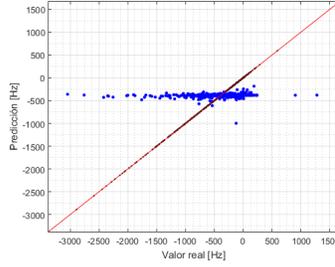
Figura 37: Estabilización del modelo de Kriging para para la estimación del band gap óptimo.

Cuadro 4: Índice de aciertos (IoA) de modelos de Kriging con diferentes funciones de regresión y correlación.

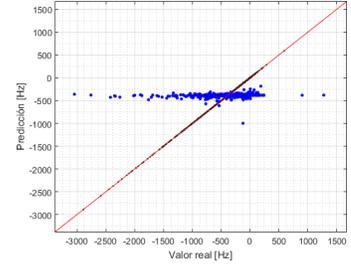
	Función de Correlación		
	Exponencial	Exponencial Generalizada	Gaussiana
Orden 0 (constante)	0,246	0,029	0,098
Orden 1 (lineal)	0,404	0,397	0,405
Orden 2 (cuadrática)	0,636	0,636	0,636



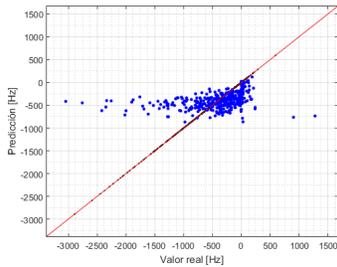
(a) Modelo de orden 0 integrando una función de correlación exponencial.



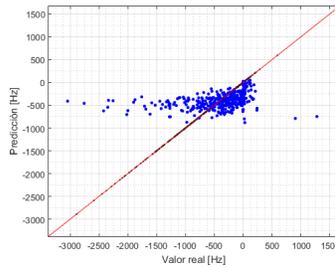
(b) Modelo de orden 0 integrando una función de correlación exponencial generalizada.



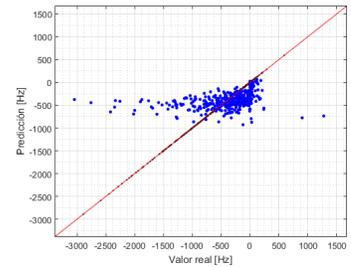
(c) Modelo de orden 0 integrando una función de correlación gaussiana



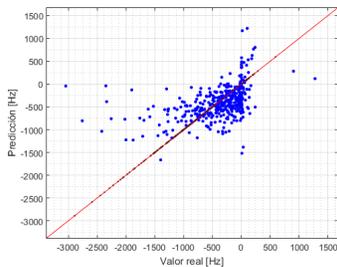
(d) Modelo de orden 1 integrando una función de correlación exponencial.



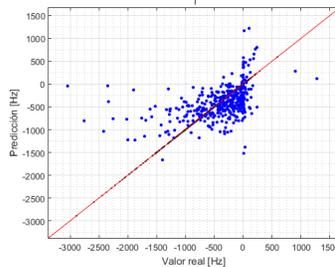
(e) Modelo de orden 1 integrando una función de correlación exponencial generalizada.



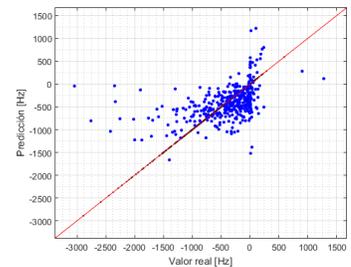
(f) Modelo de orden 1 integrando una función de correlación gaussiana



(g) Modelo de orden 2 integrando una función de correlación exponencial.



(h) Modelo de orden 2 integrando una función de correlación exponencial generalizada.



(i) Modelo de orden 2 integrando una función de correlación gaussiana

Figura 38: Variograma experimental de modelos de Kriging con distintas funciones de regresión y correlación.

Cuadro 5: Predicción del modelo de Kriging en cada iteración.

	Iteración				
	1	2	3	4	5
Máximo $\Delta\omega$ [Hz]	4440,18	4976,42	6332,14	6333,13	6331,62
Promedio $\Delta\omega$ [Hz]	20,48	166,94	428,79	759,06	1034,68
RMSE [Hz]	2387,17	1217,52	1369,13	1227,09	876,00
	6	7	8	9	10
Máximo $\Delta\omega$ [Hz]	6334,08	6334,08	6334,07	6334,07	6334,07
Promedio $\Delta\omega$ [Hz]	1306,70	1752,70	1859,53	2118,18	2337,17
RMSE [Hz]	929,85	1307,36	1227,12	1171,40	1367,78
	11	12	13	14	15
Máximo $\Delta\omega$ [Hz]	6334,08	6334,61	6334,64	6334,81	6334,85
Promedio $\Delta\omega$ [Hz]	2412,88	2507,06	2619,32	2736,95	2848,56
RMSE [Hz]	1183,46	1010,76	1349,92	1021,79	921,34

4.2.3. Celda Unitaria Optimizada

Las propiedades del punto máximo local encontrado se reportan en la tabla 6. La representación de la celda unitaria y el diagrama de bandas obtenido se muestran en la figura 39.

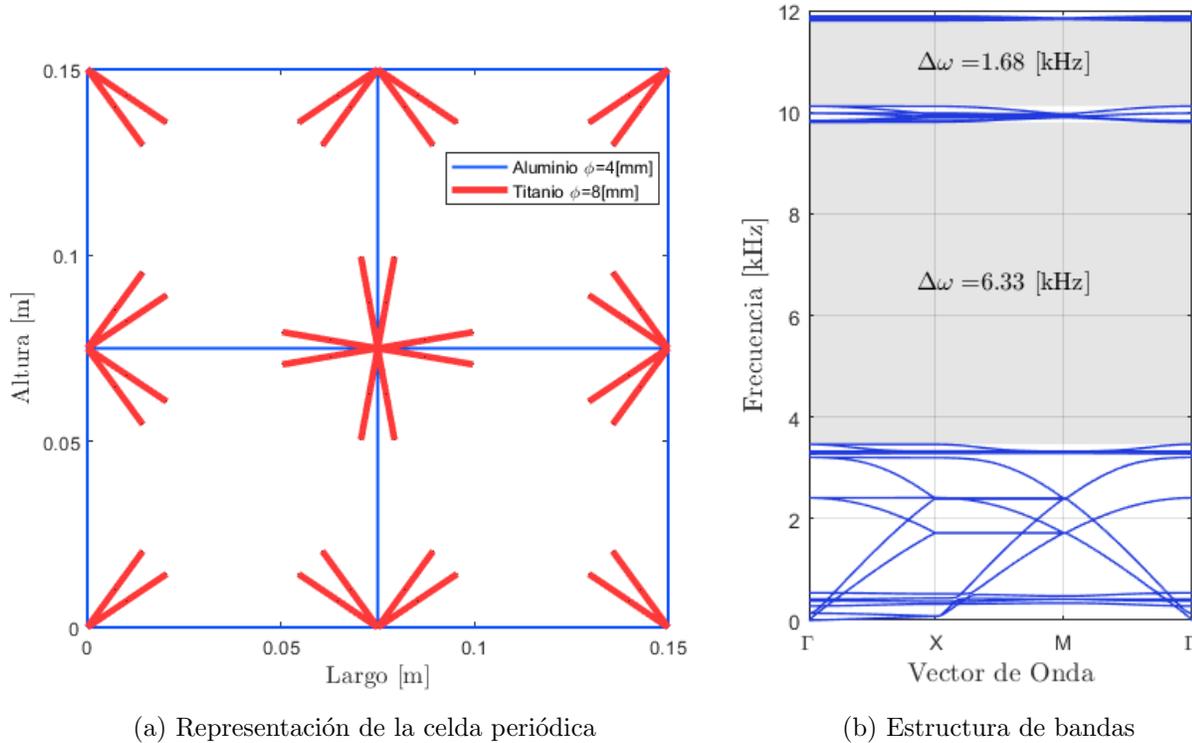


Figura 39: Diagrama de bandas de la celda unitaria optimizada.

Cuadro 6: Parámetros de la celda unitaria optimizada.

	Elemento					
	1	2	3	4	5	6
Longitud L	75 [mm]	75 [mm]	25 [mm]	25 [mm]	25 [mm]	25 [mm]
Inclinación θ	0°	45°	35°	145°	125°	260°
Masa m_R	-	-	0,0 [kg]	0,0 [kg]	0,0 [kg]	0,0[kg]
Diámetro ϕ	4 [mm]	4 [mm]	8 [mm]	8 [mm]	8 [mm]	8[mm]
Densidad ρ	2700 [$\frac{kg}{m^3}$]	2700 [$\frac{kg}{m^3}$]	19300 [$\frac{kg}{m^3}$]			
Módulo de Young E	68,9 [GPa]	68,9 [GPa]	411,0 [GPa]	411,0 [GPa]	411,0 [GPa]	411,0 [GPa]

Cuadro 7: Band gap observado sobre la celda periódica optimizada

Banda	Band gap absoluto	Band gap medio	Band Gap Relativo
	$\Delta\omega$ [kHz]	$\bar{\omega}$ [kHz]	η
n=20	6,33	6,63	0,96
n=28	1,68	10,96	0,15

4.3. Análisis Modal

En este apartado se revisan los modos de vibración obtenidos sobre la estructura periódica infinita conformada por la celda unitaria optimizada. La figuras 40, 41 y 42 muestran, de forma organizada los modos característicos asociados a las primeras relaciones de dispersión de la onda cuando el vector de onda se localiza en los puntos Γ , X y M del espacio recíproco.

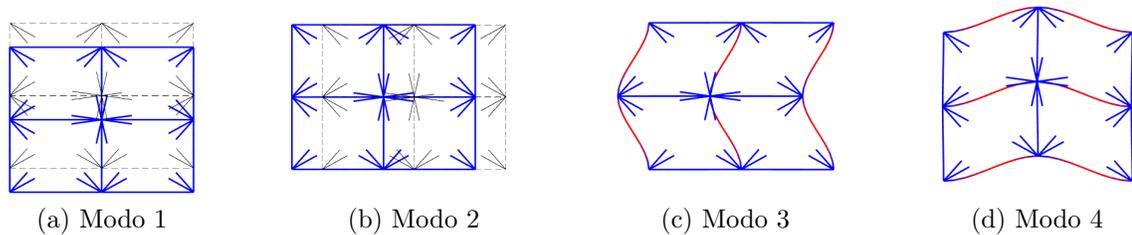


Figura 40: Primeros modos obtenidos para un vector de onda situado en el punto Γ del espacio- k .

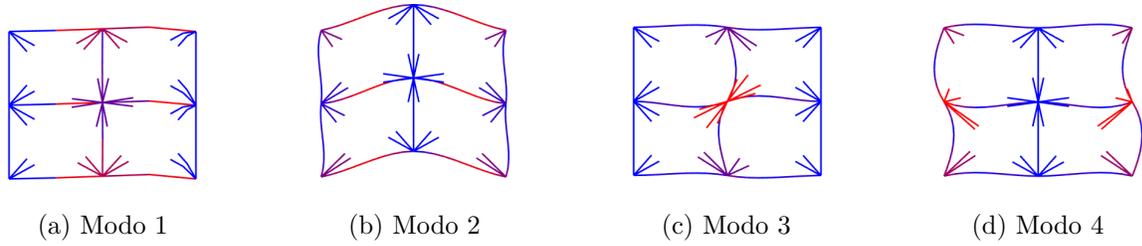


Figura 41: Primeros modos obtenidos para un vector de onda situado en el punto \mathbf{X} del espacio- k .

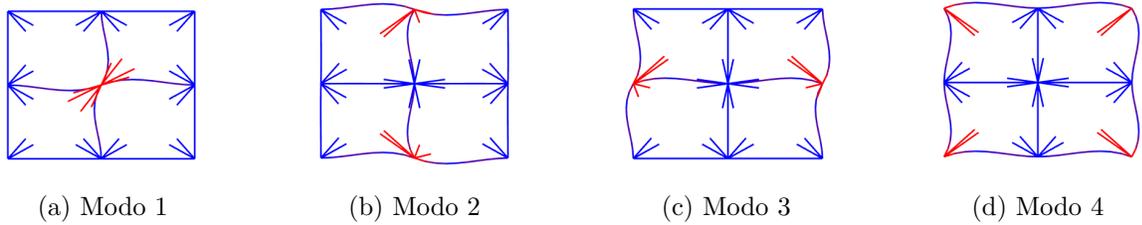


Figura 42: Primeros modos obtenidos para un vector de onda situado en el punto \mathbf{M} del espacio- k .

Las frecuencias naturales asociados a los modos anteriores se encuentran en la tabla 8. Además se detecta para la frecuencia $\omega = 8,27[kHz]$ una serie de modos de vibración locales de las vigas en voladizo.

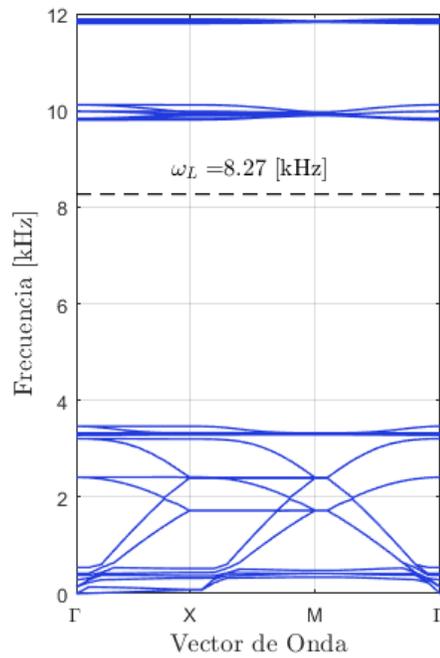


Figura 43: Frecuencia de resonancia local indicada en el diagrama de bandas.

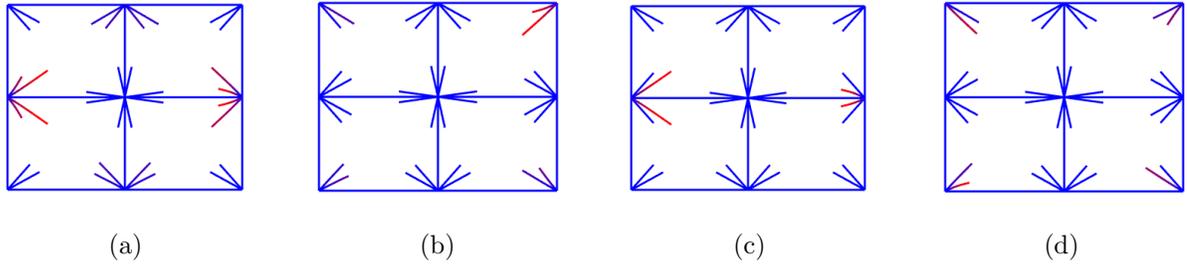


Figura 44: Modos locales de vibración.

Cuadro 8: Frecuencia local de resonancia y frecuencias naturales de los primeros modos de dispersión sobre Γ , M y M .

Vector de onda k	Modo 1 $\omega_1(k)$ [Hz]	Modo 2 $\omega_2(k)$ [Hz]	Modo 3 $\omega_3(k)$ [Hz]	Modo 4 $\omega_4(k)$ [Hz]
$k = \Gamma$	0,074	0,074	137,97	137,97
$k = X$	74,87	82,80	321,51	368,07
$k = M$	340,183	414,88	414,88	476,77
Resonancia Local : 8.27 [kHz]				

4.3.1. Modos característicos de la viga en voladizo

Para comprobar los modos de resonancia local de la estructura, se obtienen los primeros modos de vibración una viga en voladizo con las mismas propiedades que las de la celda unitaria. La figura 45 muestra los primeros 4 modos propios de vibración. Las frecuencias características se encuentran en la tabla 9.

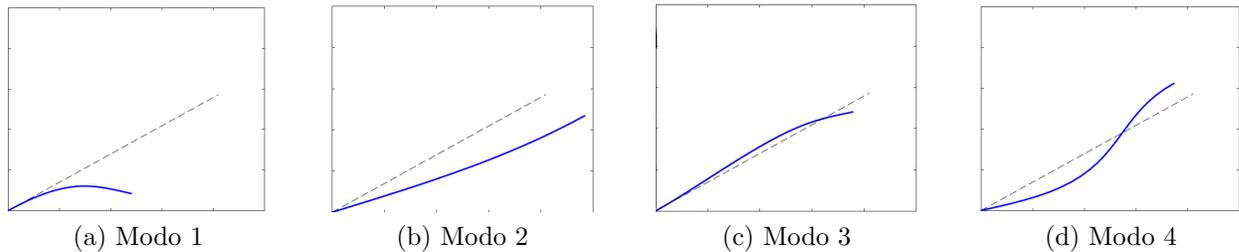


Figura 45: Primeros modos obtenidos de un elemento en voladizo.

Cuadro 9: Primeras frecuencias naturales de elemento en voladizo.

Modo 1	Modo 2	Modo 3	Modo 4
8,27 [kHz]	47,34 [kHz]	52,23 [kHz]	165,37 [kHz]

4.3.2. Panel Finito

En esta sección se simula la función de respuestas en frecuencias de un panel conformado por unidades ensambladas de la estructura de celda optimizada. Se consideran tres arreglos de 3x3, 5x5 y 10x10 paneles, sobre los que se imponen condiciones de apoyo simple en sus 4 esquinas y una condición de carga armónica unitaria sobre el punto medio de uno de sus extremos. En la figura 46 se encuentra un esquema del sistema evaluado para un arreglo 5x5. Las figuras 47 y 48 muestran los resultados obtenidos para el recorrido de la onda en dirección hacia el punto medio del borde derecho ($\Gamma \rightarrow \mathbf{X}$) y hacia el punto medio del borde superior ($\Gamma \rightarrow \mathbf{M}$), respectivamente. Sobre los gráficos obtenidos, se encuentra sombreada la zona comprendida por el band gap en el diagrama de bandas. También se indica la frecuencia local de resonancia con una línea vertical punteada.

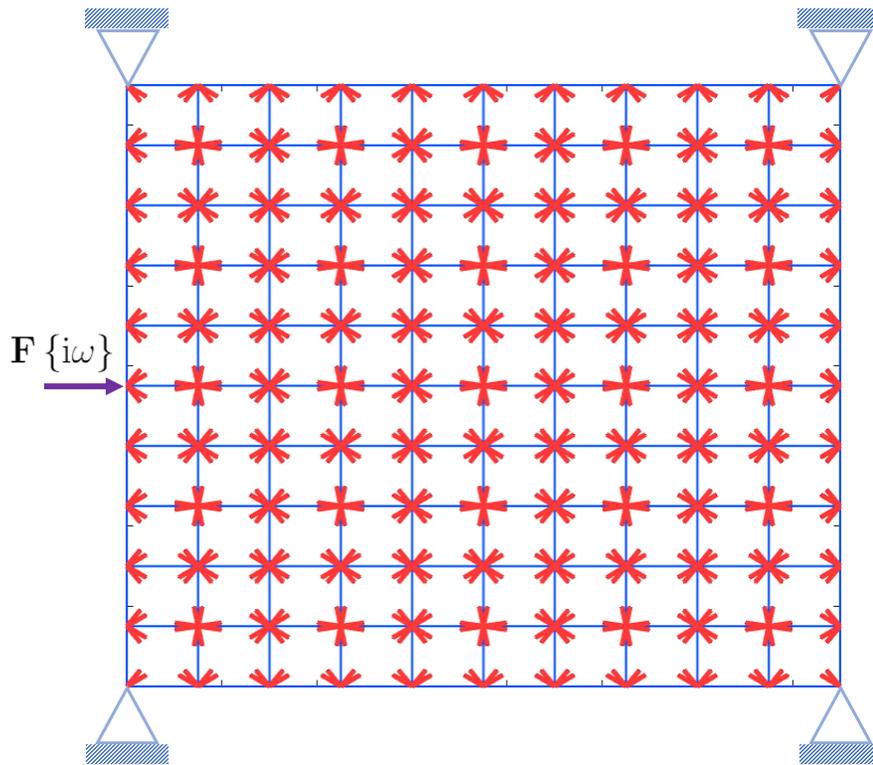
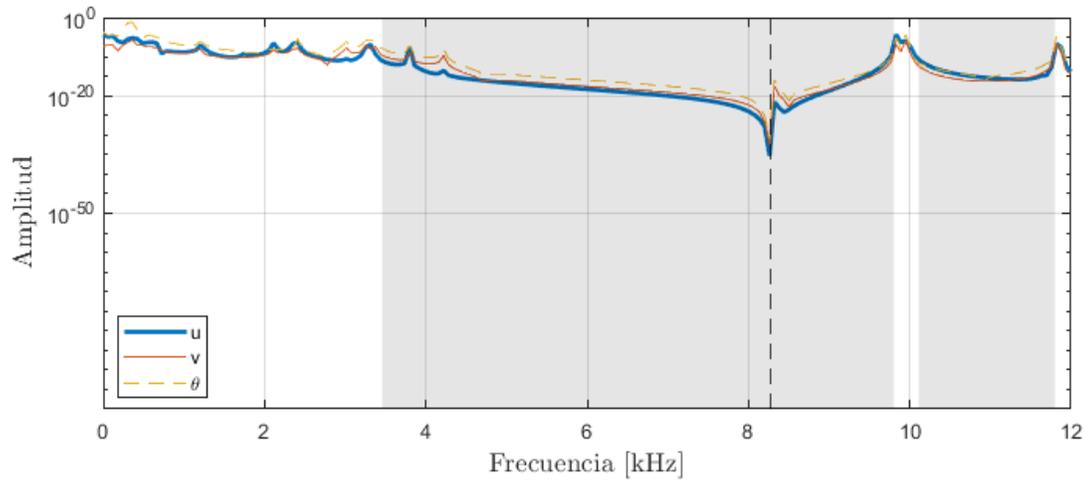
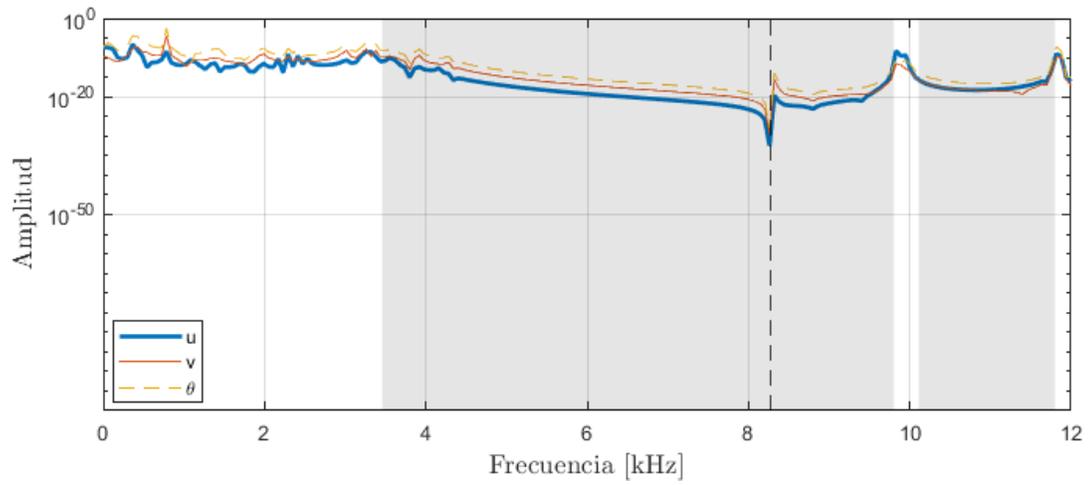


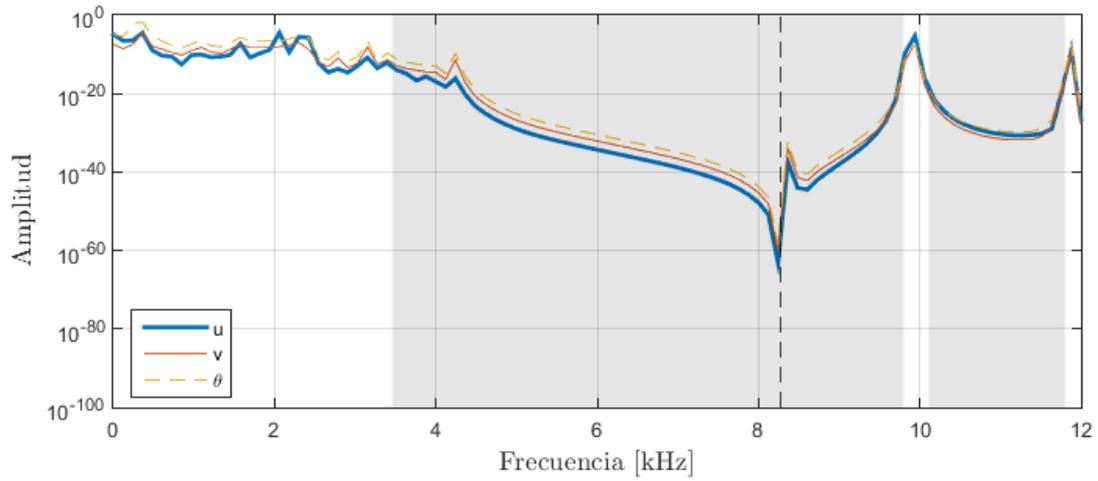
Figura 46: Ensamble 5 x 5 de la celda unitaria optimizada con apoyo simple en las esquinas y una excitación armónica unitaria en el medio del borde izquierdo.



(a) Panel 3 x 3

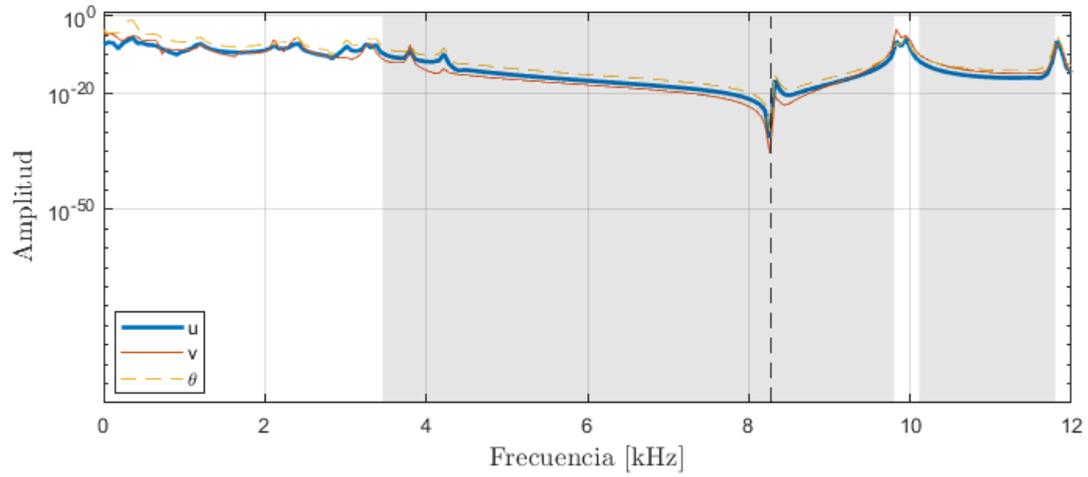


(b) Panel 5 x 5

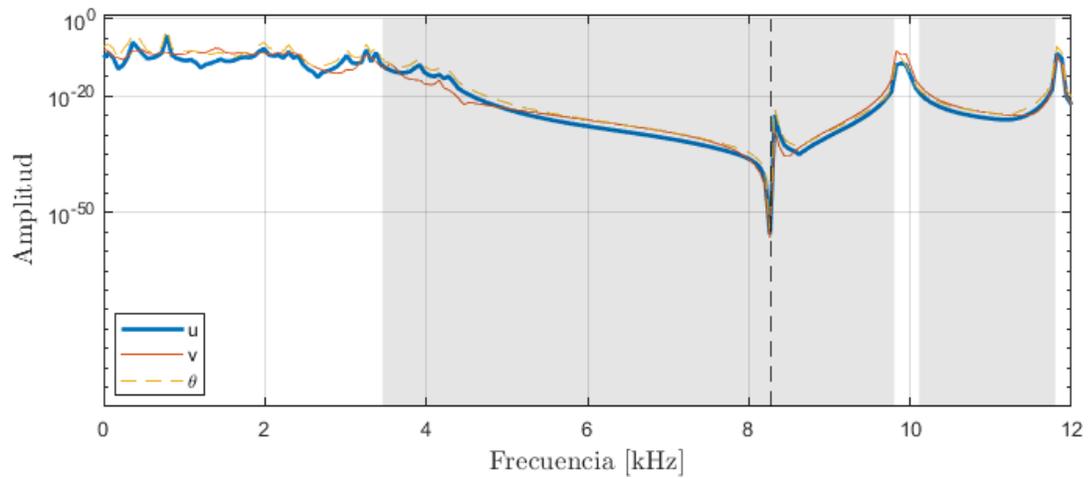


(c) Panel 10 x 10

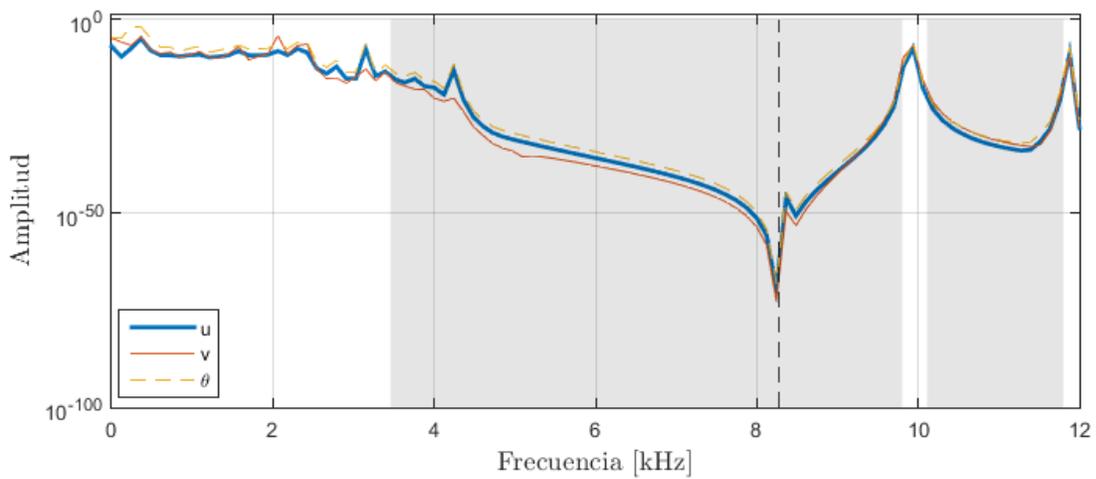
Figura 47: Función de respuesta en frecuencias en la dirección $\Gamma \rightarrow \mathbf{X}$ de distintos ensamblajes. La leyenda u , v y θ indica respectivamente el desplazamiento horizontal, vertical y angular.



(a) Panel 3 x 3



(b) Panel 5 x 5



(c) Panel 10 x 10

Figura 48: Función de respuesta en frecuencias en la dirección $\Gamma \rightarrow \mathbf{M}$ de distintos ensamblajes. La leyenda u , v y θ indica respectivamente el desplazamiento horizontal, vertical y angular.

5. Discusión y Análisis

5.1. Análisis de Refinamiento de Malla

Los resultados obtenidos dan cuenta de la capacidad del teorema de Bloch para modelar de forma efectiva la respuesta vibratoria en medios periódicos. En primera instancia, el modelo de celda unitaria con resonadores ha sido discretizado a través de elementos lineales usando la formulación de elemento viga de Euler-Bernoulli, imponiendo condiciones de borde de periodicidad infinita. Los resultados de la figura 34 muestran los diagrama de bandas obtenidos para una misma celda, pero contruidos a partir de un número distinto de elementos. En todos los diagramas de bandas es posible detectar un band gap entre $650[Hz]$ y $700[Hz]$.

De acuerdo con la cantidad de elementos en que sea subdividida la celda, mayor es la capacidad del modelo para representar la respuesta vibratoria en frecuencias altas, sin embargo, el tiempo de cómputo se incrementa, tal como se aprecia en la tabla 3. Las subdivisiones aplicadas sobre la celda muestran que un tratamiento sin refinamiento no considera todos los primeros modos de vibración característicos de la celda. Esto se comprueba por la cantidad de valores presentes en el rango inferior a $10[kHz]$, donde se contabilizan menos valores propios y, por lo tanto, algunas bandas de frecuencia son suprimidas. Éste problema se soluciona al usar mallas de 2 elementos por viga en adelante. Las bandas de frecuencia no varían de forma considerable al utilizar mallados de mayor refinamiento, por lo que un mallado de 2 elementos por viga es suficiente.

5.2. Análisis de Metamodelos

Utilizando la malla formada por dos elementos por viga (figura 36) se construye una muestra de datos distribuida usando el método LHS (Latin Hypercube Sampling). Cada punto de diseño está asociado a la función objetivo del problema de estudio, que consiste en determinar las distancias entre bandas de frecuencias adyacentes a una frecuencia de resonancia local de la estructura. De esta forma, se construye la relación de entrada y salida de datos que es incorporada en la construcción de metamodelos de diferentes órdenes y funciones de correlacion.

La tabla 4 contiene las valoraciones de exactitud de cada combinación probada en una segunda muestra. Se utiliza como métrica de cada modelo al índice de aciertos (Index of Agreements), el cual es un índice adimensional que indica en una escala desde 0 a 1 la precisión de un modelo, siendo 1 el valor de un ajuste perfecto.

Se puede comprobar a través de los variogramas presentados en la figura 38, que el orden del polinomio de regresión tiene mayor incidencia sobre la calidad del modelo, por lo que emplear polinomios de segundo orden es la opción más adecuada. Por otro lado, para modelar la correlación que existe en cada parámetro fueron seleccionadas las funciones de correlación exponencial, gaussiana y exponencial generalizada. De acuerdo con [12], una función de correlación gaussiana es adecuada para modelar procesos infinitamente diferenciables, mientras que para comportamientos lineales es usual que una función de correlación exponencial posea un buen ajuste. Por otra parte, la función de correlación exponencial generalizada presenta una dualidad entre estos dos grupos, puesto que si el parámetro de su exponente es 1 se transformara en una función exponencial, y si su exponente es 2 corresponderá a la función de correlación gaussiana. La función objetivo del estudio tiene un carácter no lineal y no se puede asegurar que exista un comportamiento único de correlación en todas las direcciones del espacio de parámetros. Es por este motivo que se selecciona a la función exponencial generalizada, ya que cuenta con la versatilidad para ajustarse a ambos tipos de comportamiento.

5.3. Análisis de Optimización mediante Metamodelos

Los metamodelos creados utilizando funciones de regresión de segundo orden y funciones de corrección exponencial generalizada son usados sobre la rutina de optimización expuesta en la sección 3.2, donde se usa el método de descenso de gradiente para buscar máximos locales del modelo. El gráfico 37 muestra el incremento del valor máximo del band gap encontrado en cada iteración, el cual se estabiliza en $6,33[kHz]$ presentando solo pequeñas mejoras a partir de la quinta iteración. Sobre el gráfico se incluye una barra que indica el error cuadrático medio (RMSE) en dimensiones de frecuencia, entre el valor estimado de un punto local máximo y su valor real calculado. El promedio de los máximos locales aumenta, lo que indica que con cada iteración más puntos se localizan próximos a un máximo local conocido. Por lo tanto se determina que el valor máximo encontrado por el modelo es una aproximación suficiente al máximo global del problema.

5.4. Celda Unitaria Óptima

El diseño óptimo, mostrado en la figura 39, acorta y ensancha a las vigas en voladizo, mientras que en la matriz de soporte ocurre lo contrario. Se asigna a las vigas en voladizo los parámetros de material de mayor rigidez y densidad (tungsteno) mientras que a la matriz se le asignan propiedades del material menos rígido y más liviano (aluminio). Esto indica que la solución óptima tiende a magnificar la frecuencia natural de los voladizos, ya que al aumentar su sección transversal y disminuir su longitud, se maximiza la rigidez. Esto se evidencia con el hecho de que las masas agregadas sobre su extremo son suprimidas.

El resultado obtenido sugiere una relación directa entre la amplitud del band gap y las propiedades de rigidez y masa que determinan las frecuencias características de las vigas en voladizo, con lo cual se explicaría que las variables de diseño seleccionadas sean aquellas cotas que magnifican la frecuencia natural de los resonadores. Si bien, la geometría de la estructura está diseñada para combinar voladizos con propiedades distintas, el máximo local encontrado satisface a la función objetivo planteada en el problema, el cual consiste en maximizar una

única banda de frecuencias. Si se optara por generar múltiples band gaps distribuidos en un rango de frecuencias, es probable que las variables de diseño se ajusten de un modo tal que las vigas sí presentarían diferencias.

El diagrama de bandas obtenido muestra que dentro del intervalo 0-12[kHz] se exhiben dos band gaps fonónicos, abarcando una extensión total por sobre los 6[kHz]. También se aprecia sobre el diagrama de la figura 43 a una banda de dispersión que se mantiene constante a la frecuencia de 8.27[kHz], y que se encuentra dentro del rango comprendido por el primer band gap. La derivada en un punto sobre la línea de dispersión indica la velocidad de propagación de la onda de Bloch, de modo que un valor constante indicaría que la onda no se está propagando. Por otro lado, los modos de vibración asociados a esa frecuencia no se ven afectados por la magnitud del vector de onda. De este modo, la frecuencia observada es independiente de la longitud de onda y la dirección de propagación y, en cambio, puede ser atribuida a una propiedad propia de la estructura. Esto puede ser verificado a través de la representación de los modos normales de vibración.

5.5. Análisis Modal

Cuando el vector de onda es localizado en Γ (figura 40 *a*) y *b*)) se pueden comprobar los modos de estado rígido del sistema. Por otra parte los modos que se observa en *c*) y en *d*) son equivalentes por la simetría de la celda. En el caso particular de la frecuencia de 8.27[kHz], se detecta la presencia de modos locales de la estructura, donde solo participan del movimiento sus elementos internos en voladizo. Algunos de ellos se reportan en la figura 44. Por lo tanto, es posible relacionar la generación del primer band gap fonónico a la aparición de un modo de resonancia local. Teóricamente, las vibraciones que se acercan a la resonancia local se propagan en modo óptico, es decir, la vibración es transferida a la resonancia interna provocando la cancelación de ésta. Este fenómeno puede ser observado en el análisis de la respuesta en frecuencias (figuras 47 y 48), sobre el cual se detecta la formación de antiresonancias cuando se alcanza a la frecuencia del modo local detectado. Por otra parte, la tabla muestra que la frecuencia de 8.27[kHz] coincide con la primera frecuencia natural de las viga en voladizo por si solas, lo cual indica que existe una relación entre las propiedades locales de los voladizos y la formación de band gaps.

5.6. Análisis sobre Paneles Finitos

Las funciones de respuesta en frecuencias de las figuras 47 y 48 son obtenidas sobre paneles con diferente número de ensamblajes, corroborando así la capacidad de la estructura para minimizar la respuesta vibratoria. Se observa que en medida que son agregadas más celdas al ensamblaje, la transmisión de vibraciones disminuye. A partir de un arreglo de 5x5 se verifica una reducción de la respuesta vibratoria a una escala de amplitudes inferiores a 10^{-20} para las frecuencias que se encuentran dentro del rango comprendido por los band gaps. Es decir, el rango de supresión se asemeja al band gap observado sobre el diagrama de bandas de la celda y es bastante preciso para modelar el comportamiento del arreglo de 5 x 5 celdas. Tanto en la dirección $\Gamma \rightarrow \mathbf{X}$ como en $\Gamma \rightarrow \mathbf{M}$ se aprecia la formación de antiresonancias cuando se alcanza la primera frecuencia característica de las vigas en voladizo, lo que demuestra la

participación de resonancias locales al interior de la estructura en la formación de band gaps fonónicos.

6. Conclusión

En este trabajo se ha desarrollado de manera favorable una metodología con la cual fue posible determinar la solución a la optimización topológica de la celda unitaria de un cristal fonónico, que maximiza la supresión de vibraciones en un amplio rango de frecuencias. Los mecanismos de propagación de onda elástica en materiales compuestos y la formación de band gaps fonónicos en medios periódicos, son tratados en detalle en el marco teórico de este trabajo, proporcionando los fundamentos que permiten explicar el comportamiento vibratorio de la estructura y la aparición de band gaps a partir de resonancias internas.

La celda en su configuración óptima muestra resultados prometedores, exhibiendo dos intervalos de supresión de ondas que se extienden por sobre la mitad del rango de frecuencias analizado en el estudio. Se comprueba que la frecuencia de resonancia local es un efecto propio de la estructura interna de la celda, ya que no depende de la longitud ni de la dirección de propagación de la onda evaluada y, por lo tanto, es un parámetro ajustable. En este estudio, se comprueba que las resonancias locales solo dependen de la rigidez y la masa de las vigas en voladizo. Por otra parte, los modos de resonancia local muestran una relación de dispersión constante en el diagrama de bandas, lo que teóricamente indica que la onda es capturada por la celda sin propagarla. En el caso de estructuras finitas, los modos locales se pueden observar a través de antiresonancias en la función de respuestas en frecuencias. Además, se evidencia que los paneles finitos manifiestan propiedades de mitigación de la onda en los mismos rangos ocupados por band gaps en el modelo de estructura infinita.

La función objetivo del problema de optimización es compleja de ser expresada, puesto que a priori se desconoce la posición de la banda de frecuencia que se desea optimizar en relación a los otros modos de dispersión de la onda. Por lo tanto, la aplicación de modelos de estimación basados en procesos Gaussianos, en remplazo de la función objetivo, es una alternativa útil para puntualizar los máximos locales del problema.

6.1. Trabajos Futuros

Los resultados de este trabajo muestran una relación directa entre la frecuencia característica de los resonadores y la amplitud en frecuencias de band gaps fonónicos, con lo cual se explica que el máximo local esté conformado por aquellas variables de diseño que magnifican la primera frecuencia natural de los resonadores. Para modificar esta tendencia, se propone añadir una nueva restricción al problema de optimización, que exija trabajar sobre bad gaps centrados a una frecuencia objetivo especificada. De esta manera los resonadores estarían forzados a ser ajustados en torno a la frecuencia especificada.

Bibliografía

- [1] M. Maldovan and E. L. Thomas, *Periodic materials and interference lithography: for photonics, phononics and mechanics*. John Wiley & Sons, 2009.
- [2] A. Khelif, A. Choujaa, S. Benchabane, B. Djafari-Rouhani, and V. Laude, “Experimental study of guiding and filtering of acoustic waves in a two dimensional ultrasonic crystal,” 2005.
- [3] M. Ripoll, “Cristalografía. redes directa y recíproca,” 2020.
- [4] G. Yi and B. D. Youn, “A comprehensive survey on topology optimization of phononic crystals,” *Structural and Multidisciplinary Optimization*, vol. 54, no. 5, pp. 1315–1344, 2016.
- [5] I. A. Veres, T. Berer, and O. Matsuda, “Complex band structures of two dimensional phononic crystals: Analysis by the finite element method,” *Journal of Applied Physics*, vol. 114, no. 8, p. 083519, 2013.
- [6] C. Comi and L. Driemeier, “Wave propagation in cellular locally resonant metamaterials,” *Latin American Journal of Solids and Structures*, vol. 15, no. 4, 2018.
- [7] V. Meruane, “Dinámica estructural,” *Apunte para el curso ME706, Santiago: Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas*, 2016.
- [8] J. S. Jensen, “Phononic band gaps and vibrations in one-and two-dimensional mass-spring structures,” *Journal of Sound and Vibration*, vol. 266, no. 5, pp. 1053–1078, 2003.
- [9] A. Qureshi, B. Li, and K. Tan, “Numerical investigation of band gaps in 3d printed cantilever-in-mass metamaterials,” *Scientific reports*, vol. 6, p. 28314, 2016.
- [10] M. Friswell and J. E. Mottershead, *Finite element model updating in structural dynamics*, vol. 38. Springer Science & Business Media, 2013.
- [11] M. P. Bendsoe and O. Sigmund, *Topology optimization: theory, methods, and applications*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [12] S. N. Lophaven, H. B. Nielsen, J. Søndergaard, and A. Dace, “A matlab kriging toolbox,” *Technical University of Denmark, Kongens Lyngby, Technical Report No. IMMTR-2002*, vol. 12, 2002.
- [13] J. P. Kleijnen, “Kriging metamodeling in simulation: A review,” *European journal of operational research*, vol. 192, no. 3, pp. 707–716, 2009.
- [14] O. Sigmund and J. Søndergaard Jensen, “Systematic design of phononic band-gap materials and structures by topology optimization,” *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, vol. 361, no. 1806, pp. 1001–1019, 2003.

- [15] Z.-H. Han, K.-S. Zhang, *et al.*, “Surrogate-based optimization,” *Real-world applications of genetic algorithms*, vol. 343, 2012.
- [16] D. Del Vescovo and I. Giorgio, “Dynamic problems for metamaterials: review of existing models and ideas for further research,” *International Journal of Engineering Science*, vol. 80, pp. 153–172, 2014.
- [17] P. F. Pai, H. Peng, and S. Jiang, “Acoustic metamaterial beams based on multi-frequency vibration absorbers,” *International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 79, pp. 195–205, 2014.
- [18] J. B. Pendry, “Negative refraction makes a perfect lens,” *Physical review letters*, vol. 85, no. 18, p. 3966, 2000.
- [19] M. S. Kushwaha, P. Halevi, L. Dobrzynski, and B. Djafari-Rouhani, “Acoustic band structure of periodic elastic composites,” *Physical review letters*, vol. 71, no. 13, p. 2022, 1993.
- [20] I. Psarobas, N. Stefanou, and A. Modinos, “Scattering of elastic waves by periodic arrays of spherical bodies,” *Physical Review B*, vol. 62, no. 1, p. 278, 2000.
- [21] A. S. Phani, J. Woodhouse, and N. Fleck, “Wave propagation in two-dimensional periodic lattices,” *The Journal of the Acoustical Society of America*, vol. 119, no. 4, pp. 1995–2005, 2006.
- [22] C. Yang and Q. Li, “Advanced lattice material with high energy absorption based on topology optimisation,” *Mechanics of Materials*, vol. 148, p. 103536, 2020.
- [23] M. Mazur, M. Leary, M. McMillan, S. Sun, D. Shidid, and M. Brandt, “Mechanical properties of ti6al4v and alsil2mg lattice structures manufactured by selective laser melting (slm),” in *Laser Additive Manufacturing*, pp. 119–161, Elsevier, 2017.
- [24] V. S. Deshpande, N. A. Fleck, and M. F. Ashby, “Effective properties of the octet-truss lattice material,” *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, vol. 49, no. 8, pp. 1747–1769, 2001.
- [25] M. F. Ashby, T. Evans, N. A. Fleck, J. Hutchinson, H. Wadley, and L. Gibson, *Metal foams: a design guide*. Elsevier, 2000.
- [26] F. Maurin, C. Claeys, E. Deckers, and W. Desmet, “Probability that a band-gap extremum is located on the irreducible brillouin-zone contour for the 17 different plane crystallographic lattices,” *International Journal of Solids and Structures*, vol. 135, pp. 26–36, 2018.
- [27] R. Sprik and G. H. Wegdam, “Acoustic band gaps in composites of solids and viscous liquids,” *Solid State Communications*, vol. 106, no. 2, pp. 77–81, 1998.
- [28] W. Elmadih, D. Chronopoulos, W. Syam, I. Maskery, H. Meng, and R. Leach, “Three-dimensional resonating metamaterials for low-frequency vibration attenuation,” *Scientific reports*, vol. 9, no. 1, pp. 1–8, 2019.

- [29] L. Cveticanin and G. Mester, “Theory of acoustic metamaterials and metamaterial beams: An overview,” *Acta Polytechnica Hungarica*, vol. 13, no. 7, pp. 43–62, 2016.
- [30] Z. Zhang, Y. F. Li, F. Meng, and X. Huang, “Topological design of phononic band gap crystals with sixfold symmetric hexagonal lattice,” *Computational Materials Science*, vol. 139, pp. 97–105, 2017.
- [31] G. Yi, Y. C. Shin, H. Yoon, S.-H. Jo, and B. D. Youn, “Topology optimization for phononic band gap maximization considering a target driving frequency,” *JMST Advances*, vol. 1, no. 1-2, pp. 153–159, 2019.
- [32] E. Denimal, L. Nechak, J.-J. Sinou, and S. Nacivet, “Kriging surrogate models for predicting the complex eigenvalues of mechanical systems subjected to friction-induced vibration,” *Shock and Vibration*, vol. 2016, 2016.

Anexos

Anexo A.

Name	$\mathcal{R}_j(\theta, d_j)$
EXP	$\exp(-\theta_j d_j)$
EXPG	$\exp(-\theta_j d_j ^{\theta_{n+1}}), 0 < \theta_{n+1} \leq 2$
GAUSS	$\exp(-\theta_j d_j^2)$
LIN	$\max(0, 1 - \theta_j d_j)$
SPHERICAL	$1 - 1.5\xi_j + 0.5\xi_j^3, \xi_j = \min(1, \theta_j d_j)$
CUBIC	$1 - 3\xi_j^2 + 2\xi_j^3, \xi_j = \min(1, \theta_j d_j)$
SPLINE	$c(\xi_j) = \begin{cases} 1 - 15\xi_j^2 + 30\xi_j^3 & \text{for } 0 \leq \xi_j \leq 0.2 \\ 1.25(1 - \xi_j)^3 & \text{for } 0.2 < \xi_j < 1, \xi_j = \theta_j d_j \\ 0 & \text{for } \xi_j \geq 1 \end{cases}$

Figura 49: Funciones básicas de correlación de Kriging