

Simulación Numérica de Problemas de Propagación de Ondas: Dominios Infinitos y Semi-infinitos

Nicolás Guarín Zapata
nguarinz@eafit.edu.co

Grupo de Mecánica Aplicada
Departamento de Ingeniería Civil
Escuela de Ingeniería
Universidad EAFIT
Medellín, Colombia
2012

Simulación Numérica de Problemas de Propagación de Ondas: Dominios Infinitos y Semi-infinitos

Nicolás Guarín Zapata
nguarinz@eafit.edu.co

*Trabajo de grado presentado como requisito
parcial para optar al título de MSc en Ingeniería*

Asesor: Juan David Gómez Cataño
Profesor Asociado
Departamento de Ingeniería Civil

Grupo de Mecánica Aplicada
Departamento de Ingeniería Civil
Escuela de Ingeniería
Universidad EAFIT
Medellín, Colombia
2012

Nota de aceptación

Presidente del jurado

Jurado

Jurado

Ciudad y Fecha

“For a successful technology, reality must take precedence over public relations, for nature cannot be fooled.”

Richard P. Feynman

Agradecimientos

Quiero agradecer inicialmente a mi familia por apoyarme en el desarrollo de la Maestría así como el presente documento, particularmente a mis padres a quienes admiro –aunque no suela decirlo a menudo.

También debo mi gratitud al Profesor Juan David Gómez quien fue mi asesor durante el desarrollo del trabajo que acá está condensado. Como asesor permitió que yo afanzara mis conocimientos en la propagación de ondas y la física computacional, para mi placer, temas que acá se presentan aunados. Al Profesor Mario Elkin Vélez quien siempre ha tenido su puerta abierta para discusiones sobre gran diversidad temas, muchos de ellos relacionados con el tratamiento formal de los fenómenos físicos presentados. Al Profesor Juan Diego Jaramillo por su énfasis en el comportamiento físico sobre los *hechos* matemáticos relacionados con la propagación de ondas y las vibraciones en estructuras.

A la Profesora Anne Christine Hladky-Hennion del *Institut d'électronique de microélectronique et de nanotechnologie -Université Lille Nord*, Francia. Por responder tan amablemente a mis consultas conceptuales relacionadas con la propagación de ondas mecánicas en materiales periódicos y quien además me envió una copia impresa de la tesis de Philippe Langlet, que sirvió como soporte para el desarrollo del trabajo.

Gracias a Edward Villegas, Santiago Echeverri y Yhefferson Gutiérrez por la gran cantidad de discusiones relacionadas con los cristales electrónicos, fotónicos y fonónicos y las discusiones en física del estado sólido. Por las discusiones en general, no creo práctico hacer mención de las muchas que han habido. Especial agradecimiento a Yhefferson quien me permitió hacer reproducción de uno de los capítulos de su trabajo de grado como anexo en este documento.

Finalmente, quiero expresar mi gratitud con Colciencias y a la Universidad EAFIT por apoyarme en dos ocasiones como Joven Investigador en el Programa Jóvenes Investigadores e Innovadores “Virginia Gutiérrez de Pineda”.

Tabla de contenido

Resumen	1
Introducción	2
1. Método de Elementos Finitos en Elastodinámica	4
1.1. Elastodinámica	4
1.1.1. Hipótesis de Deformación Plana y Ondas S Polarizadas	7
1.2. FEM en Elastodinámica	8
I Ondas en Medios Semi-Infinitos: Esparcimiento de Ondas Sísmicas	12
2. Estado del arte	13
3. Solución del Problema de Esparcimiento	16
3.1. Método de Elementos de Frontera	16
3.1.1. Método de Elementos de Frontera Directo (DBEM)	18
3.1.2. Método de Elementos de Frontera Indirecto (IBEM)	19
3.2. Acoplamiento BEM/FEM	20

3.3. Compresión de las Matrices de Rigidez	22
4. Resultados y Conclusiones	25
4.1. Conclusiones	28
II Ondas en Medios Infinitos: Dispersión en Materiales Periódicos	34
5. Estado del Arte	35
6. Propagación de Ondas en un Material Periódico	40
6.1. Teorema de Bloch	40
6.1.1. Teorema de Bloch en Elastodinámica	42
6.2. Teorema de Bloch como Condición de Frontera	43
6.3. Forma Variacional para Elastodinámica con condiciones de Bloch	44
6.4. Bloch-periodicidad en FEM	45
7. Resultados y Conclusiones	52
7.1. Material Homogéneo e Isotrópico	52
7.2. Material Bicapa	58
7.3. Celda Cuadrada con Inclusiones	59
7.4. Poro Cuadrado	61
7.5. Conclusiones	64
Trabajo Futuro	65

A. Funciones de Green para el Semi-espacio	66
B. Conceptos sobre Física del Estado Sólido	71
B.1. Cristales	71
B.2. Red Puntual	71
B.3. Características de la Red	72
B.4. Funciones Periódicas en el Espacio de Frecuencias	72
B.5. Red Recíproca	74
B.6. Primera Zona de Brillouin	76
B.7. Condición de Difracción	77
Licencia y Créditos de Figuras	80
Créditos de Figuras	80
Referencias	81

Lista de figuras

1.1. Esquema de una onda dispersiva.	7
1.2. Hipótesis de deformación plana.	8
1.3. Geometría del problema aproximada por elementos finitos.	9
3.1. Representación esquemática del problema de esparcimiento.	17
3.2. Discretización en elementos de frontera	19
3.3. Comparación de nodos DBEM e IBEM	20
3.4. Esquema que describe el acople entre las discretizaciones por BEM y FEM.	21
3.5. Apariencia de las matrices de rigidez para diferentes niveles de umbral.	24
4.1. Malla esquemática para el cañón semi-circular.	25
4.2. Gráfico del pulso de Ricker y su transformada de Fourier.	26
4.3. Función de transferencia para un cañón semicircular en el caso de una onda P que incide verticalmente para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de umbral.	27
4.4. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón semicircular para una onda P que incide verticalmente. Se muestran diferentes valores de umbral.	28
4.5. Función de transferencia para un cañón rectangular en el caso de una onda SV que incide a 30° para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de umbral.	29

4.6. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón rectangular para una onda SV que incide a 30° . Se muestran diferentes valores de umbral.	30
4.7. Función de transferencia para un cañón semicircular en el caso de una onda SV que incide verticalmente para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de semi-ancho de banda.	30
4.8. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón semicircular para una onda SV que incide verticalmente. Se muestran diferentes valores de semi-ancho de banda.	31
4.9. Función de transferencia para un cañón semicircular en el caso de una onda P que incide a 30° para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de semi-ancho de banda.	31
4.10. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón semicircular para una onda P que incide a 30° . Se muestran diferentes valores de semi-ancho de banda.	32
4.11. Comparación de los diferentes criterios de compresión.	33
5.1. Alternativas para estudiar sólidos con microestructura	39
6.1. Descripción de un material periódico en 3D	41
6.2. Descripción de un material periódico en 2D	42
6.3. Celda unitaria con rótulos para los grupos de grados de libertad	46
6.4. Funciones base para elementos finitos lineales	48
7.1. Superficie de dispersión para valores de ω bajos.	53
7.2. Curvas de dispersión para una celda homogénea con una onda incidiendo horizontalmente.	55
7.3. Representación gráfica de la imposición de las condiciones de Bloch-periodicidad en una celda hexagonal.	56
7.4. Resultados obtenidos por FEM para una celda hexagonal para un material homogéneo.	56

7.5. Ejemplo de teselado.	57
7.6. Celda rectangular para una red hexagonal.	57
7.7. Celda para un material bicapa.	58
7.8. Curvas de dispersión para una celda formada por dos capas de distinto material e igual grosor para una incidencia vertical.	59
7.9. Celda para una inclusión cuadrada.	60
7.10. Resultados para inclusiones de diferentes tamaños.	60
7.11. Celda con un poro cuadrado.	61
7.12. Relación de dispersión para un modo cuasi-transversal en una celda con un poro cuadrado en su interior.	62
7.13. Relación de dispersión para un modo cuasi-longitudinal en una celda con un poro cuadrado en su interior.	63
B.1. Esquema de una red puntual bidimensional.	73
B.2. Esquema de una red puntual bidimensional en el espacio de frecuencias.	77
B.3. Difracción de una onda plana por un elemento de volumen dV	78

Resumen

Se presenta el desarrollo de dos herramientas computacionales para la simulación de propagación de ondas en sólidos infinitos y semi-infinitos. Ambas herramientas están basadas en el Método de los Elementos Finitos (FEM). En una primera parte se presenta el acople de FEM con un Método de Elementos de Frontera (BEM) para la solución del problema de esparcimiento en una heterogeneidad en la parte superior de un semi-espacio. Se usó un criterio para comprimir las matrices de BEM para disminuir los recursos computacionales requeridos y poder tratar problemas de mayor tamaño.

En la segunda parte se describe la formulación e implementación de una herramienta de análisis para la propagación de ondas en materiales con heterogeneidades periódicas. Ésta pretende servir para caracterizar las propiedades globales del material cuando por él se propaga una onda con cierta frecuencia dada. Para esto se usaron diversos conceptos de la física del estado sólido y la solución se fundamenta en el teorema de Bloch.

Palabras clave: Propagación de Ondas, Elastodinámica Computacional, Método de Elementos Finitos, Método de Elementos de Frontera, Ondas Sísmicas, Materiales Periódicos, Ondas en Materiales Heterogéneos.

Introducción

Este documento presenta el desarrollo de dos herramientas computacionales para la simulación de propagación de ondas en sólidos infinitos y semi-infinitos. Ambas herramientas están basadas en el Método de los Elementos Finitos (FEM). En la primera parte se presenta una herramienta para la simulación del esparcimiento de ondas sísmicas en una heterogeneidad ubicada en la parte superior de un semi-espacio. Este problema es afrontado con un enfoque híbrido entre FEM y el Método de Elementos de Frontera (BEM). El semi-espacio es discretizado con BEM ya que este permite satisfacer de manera analítica las condiciones de radiación, inherentes en dominios no acotados. La heterogeneidad es trabajada con FEM ya que este permite con facilidad representar dominios compuestos de diferentes materiales, e incluso no-linealidades. La discretización de BEM es reescrita en términos de una formulación basada en desplazamientos como una matriz de rigidez estándar de FEM, lo cual permite el acople en software de elementos finitos comerciales. Adicionalmente, las matrices de BEM se simplificaron llevándolas a una forma bandeda usando un criterio establecido. Esto con la idea de ahorrar las necesidades de almacenamiento y permitiendo el uso de solucionadores iterativos. Finalmente, el algoritmo resultante se probó estudiando el esparcimiento de ondas P y SV incidiendo en cañones circulares y rectangulares.

La segunda parte describe la formulación e implementación de una herramienta de análisis para la propagación de ondas en materiales con heterogeneidades periódicas. Ésta pretende servir para caracterizar las propiedades globales del material cuando por él se propaga una onda con cierta frecuencia dada. El interés de analizar materiales de este tipo es variado. Por un lado, permite obtener las propiedades efectivas globales considerando el material como si fuera homogéneo pero teniendo en cuenta la respuesta *real* del material –proceso que se denomina *homogenización*–. Por otro lado, estos materiales pueden presentar intervalos de frecuencia en los que no se propaga ninguna onda, se denominan *frecuencias prohibidas* y tienen aplicaciones en el diseño de materiales que se usen como filtro para determinados valores de frecuencia. Por último, existe un interés creciente en el área de metamateriales que busca diseñar materiales que posean propiedades globales que no existen en la naturaleza misma, p. ej., coeficiente de Poisson negativo o densidad de masa negativa. El algoritmo se verificó contra los resultados analíticos para un material homogéneo y un material bicapa.

Notación

En este documento se usarán las siguientes notaciones:

- **Tensorial** (indicial): Todos los tensores se presentan en coordenadas cartesianas. Se asume la convención de sumas de Einstein, es decir, un índice repetido implica una sumatoria sobre dicho índice. Por ejemplo, las componentes de un vector (tensor de primer orden) se denotan como x_i , con $i = 1, 2$ –pues se trabaja bajo la hipótesis de deformación plana–. Las derivadas espaciales se denotan con una coma, entonces

$$f_{,i} \equiv \frac{\partial f}{\partial x_i} .$$

Las derivadas temporales se denotan con un punto sobre la expresión a derivar, por tanto

$$\dot{f} \equiv \frac{\partial f}{\partial t} ,$$

y entonces las velocidades y aceleraciones se representan como \dot{u} y \ddot{u} , respectivamente.

- **Vectorial:** Un vector se denota como un carácter en negrilla. Por ejemplo, el vector posición de un punto con coordenadas (x_1, x_2) se denota como \mathbf{x} . En esta notación los operadores vectoriales se usan de forma usual.
- **Matricial:** Un vector columna se escribe entre llaves $\{V\}$ y una matriz entre corchete $[K]$.

Capítulo 1

Método de Elementos Finitos en Elastodinámica

1.1. Elastodinámica

La Elastodinámica es el estudio de las ondas elásticas, las cuales están relacionadas con la teoría linealizada de la elasticidad. Una onda elástica es un tipo de onda mecánica que se propaga en un medio elástico. Mientras que la densidad volumétrica de masa aporta la *fuerza* inercial, la elasticidad del material provee la *fuerza* de restitución, siendo ambas componentes necesarias en una onda mecánica, [1-3].

En el caso de un sólido tridimensional las ondas pueden ser descritas a partir de la ecuaciones de continuidad y conservación del momento, además de las relaciones constitutivas.

- Continuidad, la cual nos dice que la cantidad de masa del cuerpo se conserva entre dos estados:

$$\dot{\rho} = -(\rho \dot{u}_i)_{,j} .$$

- Conservación del momento, la cual es una versión generalizada de la segunda ley de Newton:

$$\rho \ddot{u}_i = \sigma_{ij,j} + f_i .$$

- Relaciones constitutivas, las cuales establecen una relación entre el tensor de esfuerzos y el tensor de deformaciones. En el caso elástico lineal se usa una versión generalizada de la *Ley* de Hooke:

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \epsilon_{kl} .$$

En donde u_i es el desplazamiento de un punto material en la dirección i , ρ es la densidad volumétrica, σ_{ij} son las componentes del tensor de esfuerzos, ϵ_{kl} son las componentes del tensor de deformaciones, f_i son las componentes de las *fuerzas de cuerpo*¹ y C_{ijkl} las componentes del tensor de elasticidad y depende del material del que está hecho el medio. Para un medio isotrópico y lineal se tiene la siguiente relación constitutiva

$$\sigma_{ij} = \lambda \delta_{ij} \epsilon_{kk} + 2\mu \epsilon_{ij} \quad ,$$

siendo λ y μ los parámetros de Lamé que pueden expresarse en términos del módulo de Young y el coeficiente de Poisson como [4]

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

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

y δ_{ij} es el delta de Kronecker. A partir de las relaciones anteriores se llega a la ecuación de Navier-Cauchy

$$(\lambda + 2\mu)u_{j,ij} + \mu u_{i,jj} + f_i = \rho \ddot{u}_i \quad , \quad (1.1)$$

o en notación vectorial

$$(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) - \mu\nabla \times \nabla \times \mathbf{u} + \mathbf{f} = \rho \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} \quad .$$

La naturaleza ondulatoria de (1.1) puede verse haciendo una descomposición de Helmholtz del campo de desplazamientos en una parte longitudinal y una parte transversal [5]

$$\mathbf{u} = \nabla\varphi + \nabla \times \boldsymbol{\psi} \quad , \quad (1.2)$$

en donde φ es el *potencial longitudinal*, y por tanto $\nabla \times \varphi = 0$. $\boldsymbol{\psi}$ es el *potencial transversal*, y por tanto $\nabla \cdot \boldsymbol{\psi} = 0$.

Substituyendo (1.2) en (1.1) se llegan a dos ecuaciones de onda que están desacopladas en el caso de dominios infinitos, estas son

$$\nabla^2 \varphi + \frac{1}{\alpha^2} \nabla \cdot \mathbf{f} = \frac{1}{\alpha^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} \quad , \quad (1.3)$$

$$\nabla^2 \boldsymbol{\psi} + \frac{1}{\beta^2} \nabla \times \mathbf{f} = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \boldsymbol{\psi}}{\partial t^2} \quad , \quad (1.4)$$

los términos $\nabla \cdot \mathbf{f}$ y $\nabla \times \mathbf{f}$ corresponden a fuerzas de cuerpo en forma de campos longitudinales y transversales, respectivamente. La fuerza gravitacional podría incluirse en el primer grupo mientras

¹Las fuerzas de cuerpo son fuerzas distribuidas al interior del volumen, como fuerzas inerciales, gravitacionales o electromagnéticas.

que una fuerza generada por un campo magnético podría incluirse en el segundo. Los parámetros α y β son las rapidezces de las ondas longitudinales y transversales, respectivamente. Estas rapidezces se definen como

$$\alpha^2 = \frac{\lambda + 2\mu}{\rho} , \quad (1.5)$$

$$\beta^2 = \frac{\mu}{\rho} , \quad (1.6)$$

ya que λ, μ y ρ son números positivos $\alpha > \beta$ y por esta razón también se le llama a las ondas longitudinales *ondas P* por ser las primeras en observarse en un sismo, de la misma forma a las ondas transversales se les denomina *ondas S*.

Ya que en elastodinámica estamos hablando de ondas –longitudinales y transversales– debemos tener en cuenta que estas pueden experimentar como cualquier onda, reflexión, refracción, interferencia y difracción. En general, cuando una onda viaja de un medio con unas propiedades a otro medio con propiedades diferentes ésta puede presentar reflexión, refracción y difracción. A la superposición de estos tres fenómenos la denominaremos *esparcimiento*. En los textos en español suele encontrarse que a este fenómeno lo denominan indistintamente *esparcimiento* o *dispersión*, sin embargo el término dispersión lo usaremos para referirnos a la dependencia de la velocidad de propagación de una onda con la frecuencia de la misma. De esta forma tenemos términos para referirnos a las palabras inglesas *scattering* y *dispersion* como esparcimiento y dispersión, respectivamente.

Como se mencionó anteriormente la dispersión es el fenómeno en el cual la *velocidad de fase* depende de la frecuencia. O de manera equivalente, es el fenómeno en el cual la *velocidad de grupo* depende de la frecuencia. En el caso de medios no dispersivos la velocidad de fase y la velocidad de grupo coinciden, por tanto no se hace distinción entre ellas y se denotan como *velocidad de la onda*. Sin embargo, en el caso más general estas velocidades no coinciden y por esto es necesario hacer distinción entre ellas. La **velocidad de fase** es la velocidad a la que se propaga la fase de una onda con una frecuencia particular, se define como

$$v_f = \frac{\omega}{k} , \quad (1.7)$$

en donde ω es la frecuencia angular y k el número de onda. La **velocidad de grupo** es la velocidad a la que se propaga la envolvente de una onda, alternativamente, es la velocidad a la que se propaga un pulso o paquete de onda con cierta forma dada. Este se define como

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} , \quad (1.8)$$

la velocidad de grupo suele asociarse con el flujo de energía ligado a la onda, sin embargo estos no siempre coinciden, pero es muy común que sea así [6, 7]. A la función $\omega(k)$ se le conoce como relación de dispersión y brinda mucha información acerca de la propagación de la onda a diferentes frecuencias. La Figura 1.1 muestra una relación de dispersión y esquematiza las velocidades de fase y grupo.

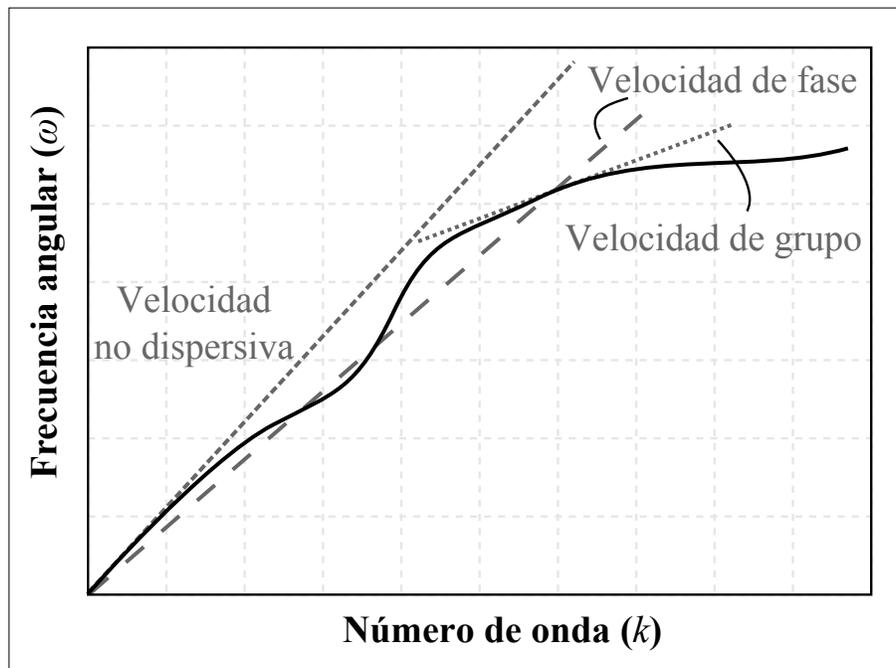


Figura 1.1. Esquema de una onda dispersiva. La velocidad de fase es la pendiente de la secante que pasa por 0 y por el punto en cuestión, mientras que la velocidad de grupo es la pendiente de la tangente.

1.1.1. Hipótesis de Deformación Plana y Ondas S Polarizadas

En este trabajo nos centraremos en el caso de deformación plana [8]. Un cuerpo en estado de deformación plana puede ser descompuesto en cortes transversales idénticos y entonces resolver el problema para uno de estos cortes. Esto es debido a la ubicación lejana de los extremos del sólido, por tanto la deformación sólo sucede en el plano medio. La Figura 1.2 muestra gráficamente la condición de deformación plana.

En el caso de una onda propagándose en un espacio infinito o semi-infinito se puede hacer una simplificación a un problema en 2D. Este problema en 2D contiene toda la información de la onda P ya que los desplazamientos son en la misma dirección que la propagación de la onda por tratarse de una onda longitudinal. En el caso de la onda S existe información que se encuentra en el plano, es decir, ondas cuyo desplazamiento se encuentra en el plano y son perpendiculares a la propagación de la onda y se denotan como ondas SV y otras cuyo desplazamiento es perpendicular al plano y se denotan como ondas SH . Las ondas SV y SH se conocen como ondas plana y antiplana, respectivamente y constituyen un caso de polarización de la onda S más general que puede tener parte del desplazamiento en el plano y parte por fuera del mismo. Para resolver el problema de la propagación de ondas en el plano se saca provecho de que el problema de la onda SH está desacoplado del relacionado con las ondas SV y P . Pues, aunque en un dominio infinito las ondas P y S están desacopladas no funciona de igual forma cuando las ondas se encuentran con una

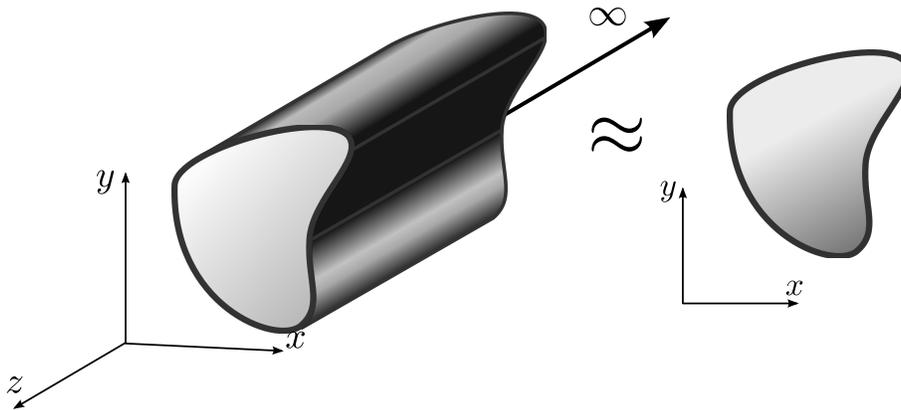


Figura 1.2. Hipótesis de deformación plana. A la izquierda está representado el sólido en tres dimensiones y a la derecha está su simplificación a un modelo 2D.

frontera en donde se presenta una relación entre los dos problemas. Esta discusión está ampliamente tratada en [1,2].

1.2. FEM en Elastodinámica

El Método de Elementos Finitos es una técnica bien conocida para la solución de ecuaciones diferenciales parciales, sujetas a condiciones de frontera (problema de valores en la frontera) y condiciones iniciales (problema de condiciones iniciales con valores en la frontera). La idea del método es la de convertir el problema a resolver en un sistema de ecuaciones lineales usando la versión débil de la ecuación diferencial en cuestión y el uso de una base de interpolación que consiste en polinomios definidos sobre dominios disjuntos (llamados elementos). Para una descripción del método pueden consultarse [9–11].

Para llegar a la forma débil a utilizar se puede partir de (1.1) y utilizar un método de residuos ponderados, ver [12], o se puede partir del Principio de D'Alembert (Teorema de trabajos virtuales) que es equivalente al Principio de Hamilton (Principio de mínima acción), ver [4,13]. El Lagrangiano asociado al problema elastodinámico es

$$\Pi(u_i) = \int_{\Omega} \epsilon_{ij} C_{ijkl} \epsilon_{kl} d\Omega - \int_{\Omega} \rho \dot{u}_i \dot{u}_i d\Omega - \int_{\Omega} f_i u_i d\Omega - \int_{\Gamma} t_i u_i d\Gamma , \quad (1.9)$$

en donde el primer término es la energía potencial de deformación, el segundo es la energía cinética del cuerpo, el tercero es la energía de deformación asociada a las fuerzas de cuerpo y el último está asociada a la deformación generada por tracciones distribuidas en la frontera del dominio. Se tiene entonces que la solución u_i del sistema es la que haga que el lagrangiano sea estacionario, en este caso particular la que minimice este funcional.

Una vez se tiene la forma variacional asociada al problema que quiere resolverse se procede a hacer una interpolación de las variables del problema, desplazamientos \mathbf{u} en este caso. Esta interpolación se hace sobre el dominio de cada elemento (ver Figura 1.3), teniendo

$$\{\mathbf{u}\} \approx [N^e] \{U^e\} \quad , \quad (1.10)$$

en donde U^e son los desplazamientos de los nodos del e -ésimo elemento y $[N^e]$ es la matriz que contiene las funciones de interpolación para el elemento e -ésimo. De igual forma pueden interpolarse las derivadas de \mathbf{u} , el tensor de deformaciones se interpola como

$$\{\epsilon\} \approx [B^e] \{U^e\} \quad , \quad (1.11)$$

en donde $[B^e]$ es la matriz que contiene las funciones de interpolación para las derivadas de \mathbf{u} .

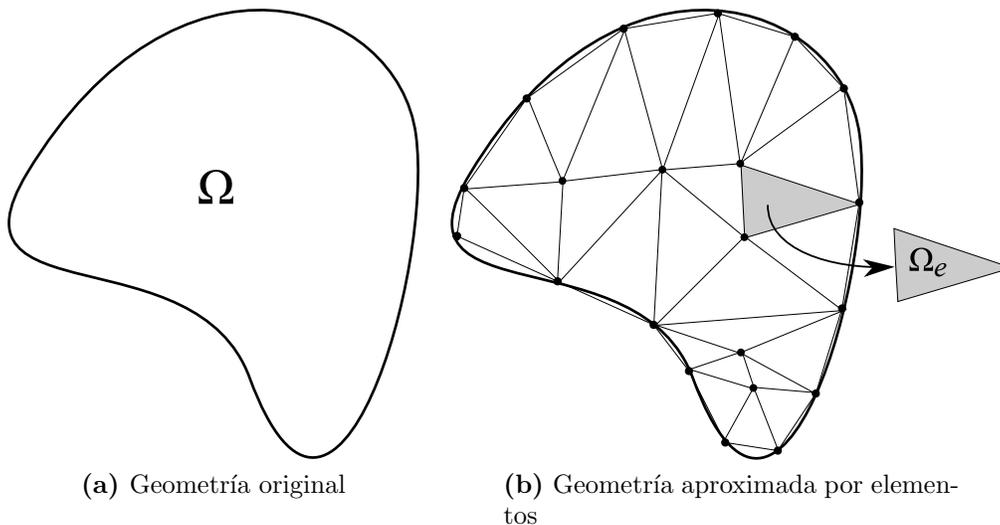


Figura 1.3. Geometría del problema aproximada por elementos finitos.

Luego de sustituir (1.10) y (1.11) en (1.9) y de aplicar la primera variación y asumiendo que no hay disipación de energía en el material ² se llega a un sistema de ecuaciones de la forma

$$[K]\{U\} - [M]\{\ddot{U}\} = \{F\} \quad , \quad (1.12)$$

²En el caso más general el sistema obtenido es $[K]\{U\} + [D]\{\dot{U}\} - [M]\{\ddot{U}\} = \{F\}$. La matriz $[D]$ representa la disipación del sistema que puede deberse por la inmersión del sólido en el seno de un fluido viscoso, o por el calentamiento del sólido internamente [1].

siendo

$$\begin{aligned} [K] &= \sum_e \int_{\Omega_e} [B^e]^T [C] [B^e] d\Omega_e , \\ [M] &= \sum_e \int_{\Omega_e} \rho [N^e]^T [N^e] d\Omega_e , \\ \{F\} &= \sum_e \int_{\Omega_e} [N^e]^T \mathbf{f} d\Omega_e + \sum_s \int_{\Gamma_s} [N^e]^T \mathbf{t} d\Gamma_s , \end{aligned}$$

con $[C]$ el tensor de elasticidad organizado como matriz según la notación de Voigt [8], \mathbf{f} son las fuerzas de cuerpo, \mathbf{t} son las tracciones sobre la superficie y los subíndices e y s se refieren a elementos en el dominio y sobre la frontera, respectivamente.

La ecuación (1.12) representa un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias en el tiempo que puede ser resuelto por algún método numérico como Diferencias Finitas o Runge-Kutta, para los métodos en sí ver [14], para los métodos aplicados a FEM ver [10]. Otra opción para resolver (1.12) es asumir que los desplazamientos y las fuerzas de cuerpo tienen un comportamiento armónico, i.e.

$$\begin{aligned} U &= \hat{U} e^{i\omega t} , \\ F &= \hat{F} e^{i\omega t} , \end{aligned}$$

en donde $i = \sqrt{-1}$. \hat{U} es el vector que representa el desplazamiento de los puntos nodales con un movimiento armónico de frecuencia ω , asimismo \hat{F} es el vector que representa las fuerzas nodales que son armónicas y tienen frecuencia angular ω . Remplazando estos valores en (1.12) se obtiene

$$[K]\{\hat{U}\} - \omega^2[M]\{\hat{U}\} = \{\hat{F}\} , \quad (1.13)$$

a resolver (1.13) se le denomina *análisis armónico* en la literatura. Para encontrar la solución para una una excitación $F(t)$ se resuelve (1.13) para diferentes valores de ω tomando \hat{F} como una fuerza unitaria de frecuencia ω y entonces se tendría la función de transferencia del sistema. Posteriormente se obtiene la respuesta en el tiempo convolucionando la transformada de Fourier de $F(t)$ con la función de transferencia. Este tipo de problemas son los que se tratan en la primera parte del trabajo.

Para la segunda parte del trabajo se toma (1.13) y se hace $\hat{F} = 0$ obteniendo

$$[K]\{\hat{U}\} = \omega^2[M]\{\hat{U}\} , \quad (1.14)$$

que es un problema de valores propios generalizado. Debido a la base física de donde se obtienen las matrices $[K]$ y $[M]$ están son simétricas y positivas definidas (la matriz de rigidez K puede ser positiva semi-definida), por tanto los valores propios ω^2 son todos positivos o iguales a cero. Una forma de resolver este problema de valores propios generalizado es realizar una factorización de Cholesky de la matriz de masa $[M] = [C]^T [C]$ y convertir el sistema a

$$[\hat{K}]\{y\} = \omega^2\{y\} ,$$

con $[\hat{K}] = [C]^{-T}[K][C]^{-1}$, $y = [C]\{\hat{U}\}$. Y luego de esto aplicar un algoritmo de solución de valores propios estándar [15].

Parte I

Ondas en Medios Semi-Infinitos: Esparcimiento de Ondas Sísmicas

Capítulo 2

Estado del arte

Esta parte del documento se refiere a métodos de solución para el problema de esparcimiento de ondas elásticas. Uno de los principales retos para la simulación numérica de este problema, cuando se trata con dominios infinitos o semi-infinitos, es la imposición de las condiciones de radiación de una manera adecuada [16]. Cuando el análisis se realiza usando un método de descomposición de dominio, p. ej., el Método de Diferencias Finitas (FDM) o FEM, el dominio computacional debe estar descrito por un dominio finito. Esto genera una superficie de truncamiento en donde deben imponerse condiciones de frontera que reflejen la infinitud del problema original. Aunque existen gran variedad de métodos para la imposición de fronteras absorbentes de manera eficiente en la literatura [17, 18], su uso a nivel práctico es aún limitado. Esto se debe en buena medida a la complejidad asociada a muchas de las formulaciones disponibles o, además, por requerir de tipos especiales de análisis no disponibles en códigos comerciales y por sus limitantes en cuanto a memoria de cómputo.

En el presente trabajo se muestran los resultados de la exploración de técnicas de solución aproximadas que pueden ser fácilmente implementadas y acoplada en software de elementos finitos comerciales, siendo herramientas útiles para la solución de problemas de esparcimiento de escala moderada. En general, la complejidad de las condiciones de frontera de radiación es una función del grado de no-localidad espacio-temporal –con qué puntos de la frontera interactúa cada punto sobre la misma– considerada en el modelo. En los casos clásicos de FDM y FEM, la no-localidad es una condición que no es natural. Entonces, con la idea de obtener un método de solución práctico, el analista debe sacrificar la precisión para ganar localidad. Además, se han obtenido buenos resultados con el compromiso entre la no-localidad y la ubicación de la superficie de truncamiento más lejos de la superficie libre, lo que lleva a modelos computacionales grandes. Recientemente se pueden encontrar simulaciones a gran escala en donde se usan métodos de descomposición de dominio en trabajos de Frankel (1993) [19], Komatitsch y Tromp (1999) [20], Bielak et al (2003) [21, 22], Komatitsch et al (2004) [23], Min et al (2003) [24], Frehner et al (2008) [25], Lee et al (2008, 2009) [26–28], Ichimura et al (2009) [29], Käser et al (2009) [30], Bielak et al (2010) [31],

Chaljub et al (2010) [32], Lan and Chang (2011) [33] and Cupillard et al (2012) [34].

En una segunda clase de métodos, la condición de radiación es impuesta en términos de formulaciones integrales en la frontera que tienen una interacción no-local entre los términos de la frontera. Estos, se corresponden con diferentes Métodos de Elementos de Frontera (BEM). En este caso la condición del medio infinito se satisface de manera analítica haciendo uso de la función de Green del problema [5, 16, 35, 36]. Los algoritmos resultantes son inherentemente no-locales, tanto en el espacio como en el tiempo. En términos generales, las formulaciones basadas en integrales en la frontera dan resultados con alta exactitud aunque son computacionalmente demandantes; los altos costos computacionales son en parte debidos a lo complejo de las funciones de Green de algunos problemas. Las matrices resultantes de BEM, en general, no son simétricas y son densas (completamente pobladas), además el método presenta dificultades para tratar con materiales heterogéneos y con no-linealidades. El uso de BEM para la solución del problema de esparcimiento de ondas elásticas puede ser revisado en Pao y Varatharajulu (1976) [16], Beskos y Manolis (1988) [37], Sánchez-Sesma y Campillo (1991) [38], Banerjee (1994) [39], Sánchez-Sesma y Luzón (1995) [40], Janod y Coutant (2000) [41], Iturrarán-Viveros et al (2005) [42] entre otros.

Una tercera estrategia de solución que es comúnmente usada es una combinación que tiene en cuenta los efectos de radiación usando BEM mientras que el dispersor (incluyendo heterogeneidades o no-linealidades) es tratado con un algoritmo de FEM, ver por ejemplo Brebbia y Georgiou (1979) [43], Beer y Meek (1983) [44], Banerjee (1994) [39], Zienkiewicz et al (1997, 2005) [11, 45], Boutchicha et al (2007) [46], Helldörfer et al (2007) [47], Seghit et al (2009) [48] y Bielak et al (2009) [49]. Este enfoque es bastante atractivo en el caso de modelizar el subdominio de BEM con una formulación basada en desplazamientos, haciendo más sencillo el acople con la parte del modelo discretizada con FEM. En este caso las condiciones de frontera de espacio infinito o semi-infinito se reducen a la forma de un elemento finito basado en desplazamientos simple, y por tanto puede ser incorporado en una gran cantidad de software comercial de elementos finitos que permitan la inclusión de subrutinas de usuario, por ejemplo, Abaqus[®] [50] y FEAP [51]. A pesar de que esta técnica es ampliamente conocida, las matrices de rigidez resultantes que corresponden a las condiciones de frontera de espacio infinito siguen siendo densas, lo cual destruye el carácter bandedo de las matrices en el algoritmo de elementos finitos, convirtiéndose en el parámetro que controla los requerimientos de memoria.

Como se mencionó anteriormente, esta parte del documento presenta algunas técnicas numéricas aproximadas para la solución del problema de esparcimiento de ondas elásticas para escenarios de un tamaño moderado que puedan ser incluidas en software de elementos finitos comerciales. El enfoque que se trabajó está basado en la conversión de la matriz de rigidez del subdominio discretización con BEM, denominado *super elemento de frontera*, a una forma bandeda. Esta operación de bandear la matriz de rigidez resultante y no las matrices de desplazamientos y tracciones de BEM directamente es obligatoria ya que la inversa de una matriz bandeda no es bandeda, en general, y por otro lado, el producto de matrices bandedas es una matriz bandeda pero con un ancho de banda que es mayor que el de las matrices originales. Se conocen aproximaciones similares en el caso de algoritmos de BEM puros. Bouchon et al (1995) [52] usaron un criterio

en el que hacían cero todos los términos que estuvieran por debajo de un umbral prefijado para hacer que la matriz fuera dispersa. Ostrowski et al (2006) [53] usaron matrices jerárquicas y una aproximación adaptativa cruzada, el cuál es un procedimiento completamente algebraico, para comprimir los operadores integrales de BEM en forma discreta. Abe et al (2001) [54] y Eppler y Harbrecht (2005) [55] usaron un BEM basado en *wavelets* para empaquetar las matrices resultantes. El Método de Elementos de Frontera con Multipolos Rápidos (FM-BEM), Liu (2009) [56], ha ganado popularidad gracias a su bajo costo tanto en requerimientos de almacenamiento como en tiempo de cálculo. Estos métodos están basados en una expansión lejana para los kernels de las ecuaciones integrales. Fujiwara (1998, 2000) [57, 58] usó un método FM-BEM para resolver problemas de esparcimiento de ondas elásticas en 2D y 3D.

Capítulo 3

Solución del Problema de Esparcimiento

3.1. Método de Elementos de Frontera

El problema de esparcimiento está esquematizado en la Figura 3.1. El dispersor es tratado con un algoritmo de FEM clásico mientras que el semi-espacio es tratado con BEM. La forma de trabajar el campo de desplazamientos es igual a la que presentaron Bielak y Christiano [60] en donde la única incógnita en el semi-espacio es el campo esparcido,

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}^0 + \mathbf{u}^s,$$

en donde \mathbf{u} representa el campo de desplazamientos totales, \mathbf{u}^0 el campo incidente más el reflejado y \mathbf{u}^s el campo esparcido. Se desea expresar el problema en términos del campo esparcido, para esto se usa el hecho de que el campo de tracciones en la frontera puede expresarse como $\mathbf{t} + \mathbf{t}^0 + \mathbf{t}^s = 0$. Matemáticamente, esto puede interpretarse como una serie de fuentes de campo esparcido, ubicadas sobre la superficie de contacto entre los dos medios. El problema se formula entonces en términos de las funciones de Green usando un teorema de representación integral (Método de Frontera Directo) o una superposición de fuentes puntuales ubicadas sobre la frontera (Método de Frontera Indirecto).

Independientemente de si el Método de Elementos de Frontera que se use es Directo o Indirecto, ambos métodos se basan en el concepto de soluciones fundamentales o funciones de Green para un problema específico $G_{ij}(\mathbf{x}; \xi)$ y $H_{ij}(\mathbf{x}; \xi, \hat{n}_\xi)$. Estas funciones nos permiten expresar, respectivamente, el desplazamiento y la tracción en la dirección i -ésima en un punto \mathbf{x} debidas a una carga

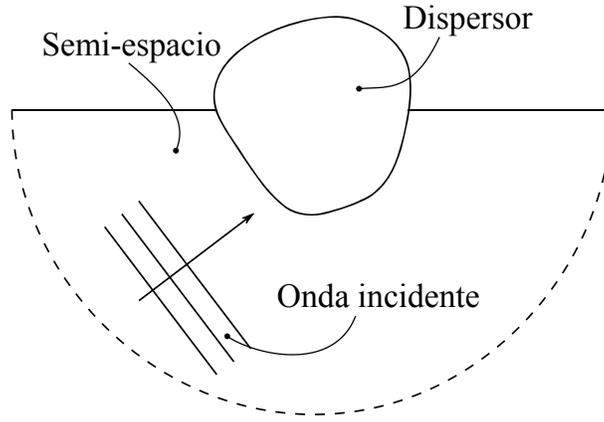


Figura 3.1. Representación esquemática del problema de esparcimiento.

puntual aplicada en la dirección j -ésima en el punto ξ como puede verse en(3.1)

$$u_i(\mathbf{x}) = G_{ij}(\mathbf{x}; \xi)P_j(\xi), \quad (3.1a)$$

$$t_i(\mathbf{x}) = H_{ij}(\mathbf{x}; \xi, \hat{n}_\xi)P_j(\xi). \quad (3.1b)$$

Entonces un componente fundamental para la aplicación de BEM es conocer las soluciones fundamentales, o funciones de Green del problema. Si escribimos la ecuación diferencial en forma abstracta como

$$\mathcal{L}u_i(\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}), \quad (3.2)$$

la función de Green sería la solución de la ecuación

$$\mathcal{L}^*G_{ij}(\mathbf{x}; \xi) = \delta_{ij}(\mathbf{x} - \xi) , \quad (3.3)$$

\mathcal{L}^* es el operador adjunto de \mathcal{L} , en el caso elastodinámico $\mathcal{L}^* = \mathcal{L}$ y se dice que el operador es autoadjunto. Desde un punto de vista físico puede relacionarse a G_{ij} con la respuesta que tiene el sistema a un estímulo puntual (representado por el delta de Dirac), así como u es la respuesta (como desplazamiento) a un estímulo f que es una densidad volumétrica de fuerza. En el caso de un semi-espacio el problema debe estar sujeto a condiciones de superficie libre (tracciones nulas) y los desplazamientos generados por el campo esparcido deben ser cero en el infinito, estas condiciones de frontera deben cumplirse tanto para la función u y sus derivadas como para la función G_{ij} y sus derivadas.

En el caso de un dominio acotado la función de Green puede expresarse como una superposición de las funciones propias del operador \mathcal{L} , en [5, 39] se expresan algunos métodos para calcular las funciones de Green en algunos problemas. En el caso de problemas semi-infinitos la función de Green suele calcularse a partir de la función de Green del problema infinito usando el método de las

imágenes [36,61] que es un procedimiento estándar en electromagnetismo. En el caso elastodinámico el método de las imágenes no satisface la condición de tracciones nulas y aparece un término extra debido a que las componentes cortantes de las tracciones de la fuente y la imagen van en la misma dirección [2,3,62], Bouchon y Aki [63] plantearon un método basado en la superposición de fuentes puntuales para números de onda horizontales discretos ubicados sobre la superficie. Debido a la complejidad de estas expresiones se presentan en el anexo **Funciones de Green para el Semi-espacio**.

Una vez obtenidas las matrices que representan de manera discreta al dominio de interés se procede a excitar la superficie de contacto entre el semi-espacio y el dispersor, ver [60], para diferentes valores de frecuencia. Estos valores de frecuencia se barren en un intervalo que está relacionado con el espectro de las señales para las que se desea conocer la respuesta. Una vez se resuelve para cada frecuencia lo que se obtiene es la función de transferencia para esa frecuencia, para conocer la respuesta – en el tiempo – a dicho estímulo basta con realizar la convolución entre la transformada de Fourier de la señal y de esta función de transferencia.

3.1.1. Método de Elementos de Frontera Directo (DBEM)

El Método de Elementos de Frontera Directo se basa en el teorema de reciprocidad de Betti para llevar a una representación integral conocida como la identidad de Somigliana [1,39] que es la base de la Ecuación Integral en la Frontera (BIE, del inglés *Boundary Integral Equation*) que trata el método numérico. La BIE también puede ser obtenida a partir de las ecuaciones (3.2) y (3.3) e integrando sobre el dominio de interés [5], lo cual puede ser entendido como un método de residuos ponderados en donde se escogen las funciones *test* como las funciones de Green del problema.

La ecuación en la frontera (BIE) a resolver es

$$C_{ij}(\xi)u_i(\xi) = \int_{\Gamma} G_{ij}(\mathbf{x}; \xi)t_i(\mathbf{x}, \hat{n}_x)d\Gamma(\mathbf{x}) - \int_{\Gamma} H_{ij}(\mathbf{x}, \hat{n}_x; \xi)u_i(\mathbf{x}, \hat{n}_x)d\Gamma(\mathbf{x}) + \int_{\Omega} G_{ij}(\mathbf{x}; \xi)f_i(\mathbf{x}, \hat{n}_x)d\Omega(\mathbf{x}) , \quad (3.4)$$

en donde \hat{n}_x es el vector normal a la superficie en el punto \mathbf{x} , C_{ij} es un coeficiente que depende de la suavidad de la frontera¹ en el punto de integración y toma el valor de 1/2 para fronteras suaves, t_i es el vector de tracciones, u_i es el vector de desplazamientos y f_i es el vector de fuerzas de cuerpo.

Una vez formulada la representación integral para el problema se procede con una discretización de la frontera del dominio en elementos para la obtención de un sistema de ecuaciones algebraicas.

¹Este coeficiente está relacionado con el ángulo que subtiende la superficie (o contorno en el caso 2D) y desde el punto de vista físico se relaciona con el hecho de cómo se distribuirían las tracciones. En el caso de una frontera suave el valor es de $\frac{1}{2}$, para esquinas existen formas de calcular este coeficiente, ver por ejemplo [39,64]. El valor de este coeficiente también puede ser obtenido a partir de consideraciones de equilibrio.

Los elementos considerados son líneas rectas con el valor de la variable (desplazamiento, tracción) en su centroide, como se muestra en la Figura 3.2. Luego de seleccionar un punto de observación

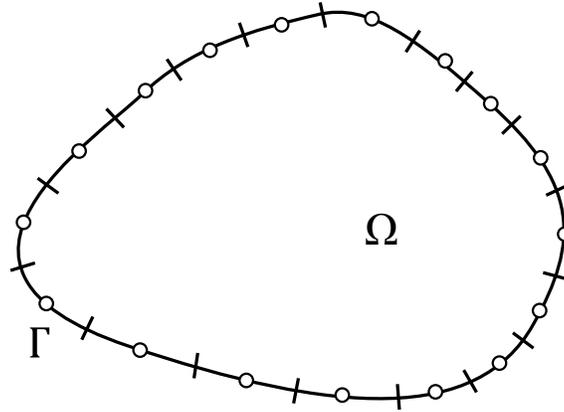


Figura 3.2. Dominio del problema (Ω) y su frontera (Γ). La frontera se discretiza en elementos (segmentos de recta entre líneas), y los puntos de colocación están ubicados en la mitad de los elementos (representados con círculos blancos).

ξ^l y aplicar colocación a lo largo de los N puntos nodales \mathbf{x}^k obtenemos

$$C_{ij} u_i^l = G_{ij}^{kl} t_i^k - H_{ij}^{kl} u_i^k, \quad (3.5)$$

en donde G_{ij}^{kl} y H_{ij}^{kl} son los coeficientes de influencia y se calculan con las integrales de las funciones de Green sobre el elemento k y el punto de colocación es ξ^l .

3.1.2. Método de Elementos de Frontera Indirecto (IBEM)

La formulación anterior se denomina directa ya que usa variables que tiene un significado físico y puede ser deducido de un Teorema de Trabajo Recíproco. La deducción del método indirecto puede iniciarse a partir de un teorema de representación para un problema exterior y uno interior. Luego de tener estas soluciones se superponen y la diferencia entre las soluciones interior y exterior es una nueva variable en el sistema (en [65] se presenta la equivalencia entre las dos variantes, en [38, 39] también se presentan este procedimiento).

Aunque la versión indirecta de BEM está comúnmente asociada con la inclusión de variables sin significado físico, estas nuevas variables pueden recibir una interpretación física. En el caso elastodinámico se corresponden con densidades de fuerza sobre la frontera y por tanto la ecuación integral puede verse como una superposición de cargas puntuales ubicadas en la frontera, matemáticamente sería equivalente a realizar la integral sobre la frontera de las ecuaciones (3.1), que es un procedimiento estándar en electrostática en donde se integran densidades de carga para obtener los valores de potencial y campo eléctricos.

Asumiendo una frontera suave y despreciando las fuerzas de cuerpo, la ecuación integral para el IBEM es

$$u_i(\mathbf{x}) = \int_{\Gamma} G_{ij}(\mathbf{x}; \xi) \phi_j(\xi) d\Gamma(\xi), \quad (3.6a)$$

$$t_i(\mathbf{x}, \hat{n}_x) = \frac{1}{2} \phi_j(\mathbf{x}) + \int_{\Gamma} H_{ij}(\mathbf{x}; \xi, \hat{n}_\xi) \phi_j(\xi) d\Gamma(\xi), \quad (3.6b)$$

en donde ϕ_j es la función de densidad de fuerzas sobre la frontera.

De igual forma que se hizo en el caso directo se genera un sistema de ecuaciones algebraicas luego de seleccionar \mathbf{x}^k como punto de observación y realizar colocación a través de los N puntos nodales ξ^l se obtiene

$$u_i^k = \tilde{G}_{ij}^{kl} \phi_j^l, \quad (3.7a)$$

$$t_i^k = \tilde{H}_{ij}^{kl} u_j^l, \quad (3.7b)$$

en donde \tilde{G}_{ij}^{kl} y \tilde{H}_{ij}^{kl} tienen el mismo significado que en algoritmo directo, sin embargo, hay que tener en cuenta que los puntos de observación y colocación se han intercambiado. Debe notarse, además, que las matrices de desplazamientos G_{ij}^{kl} y \tilde{G}_{ij}^{kl} son iguales debido a las simetrías en la función de Green. Por el contrario, las matrices de tracciones tienen transpuestos tanto los índices de las direcciones como los argumentos de evaluación y por tanto no coinciden. La comparación de los esquemas de colocación se presenta en la Figura 3.3.

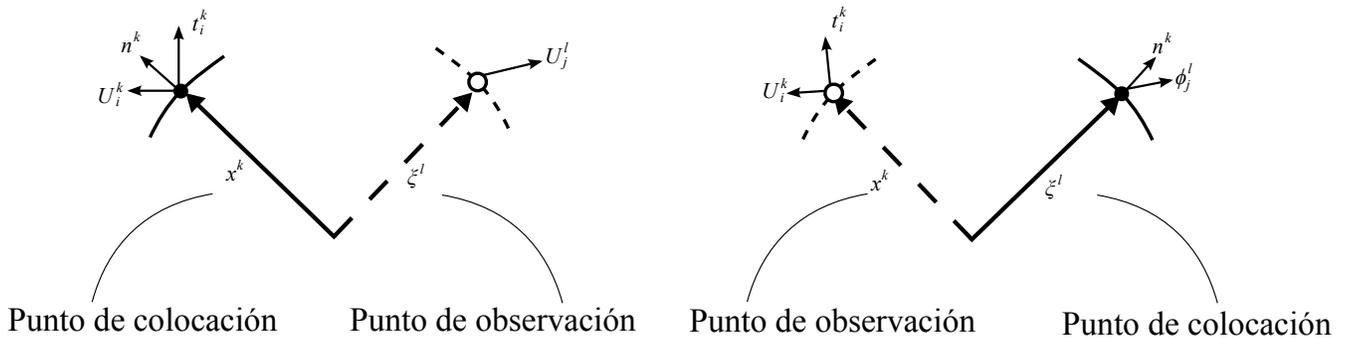


Figura 3.3. Definición de los puntos de observación y colocación en la formulación directa (izquierda) e indirecta (derecha)

3.2. Acoplamiento BEM/FEM

La idea principal de acoplar estos dos métodos es la de obtener mejores resultados que usando cada método por separado. Este procedimiento de acople puede hacerse principalmente de dos

formas, una es transformar la región discretizada con FEM a su formato equivalente en BEM y la otra consiste en transformar el subdominio aproximado con BEM a su formato equivalente en FEM. Esta última posibilidad es más atractiva ya que gran cantidad de software de Elementos Finitos se ha escrito y además es un algoritmo que ha sido más ampliamente estudiado. El problema de acoplar estos dos subdominios se reduce a reescribir las ecuaciones de BEM que relacionan incógnitas nodales de tracciones y desplazamientos con tracciones y desplazamientos prescritos, a una forma equivalente que relacione fuerzas y desplazamientos. En el caso de problemas semi-infinitos el problema se simplifica ya que la superficie de BEM que no está en contacto con el dominio de FEM, denotada con S_M en la Figura 3.4, tiene tracciones iguales a cero y por tanto no introduce términos independientes en el sistema de ecuaciones final. Para el problema de la onda

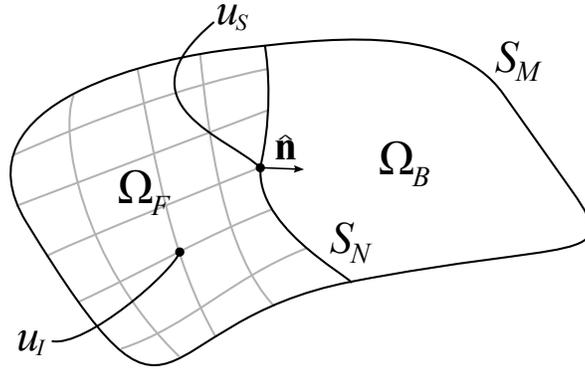


Figura 3.4. Esquema que describe el acople entre las discretizaciones por BEM y FEM.

plana que incide la relación de rigidez que se debe implementar en el código de FEM es la de un Super-Elemento de Frontera y la información del campo incidente está condensada en el vector de cargas nodales, ver [60]. Volviendo a la Figura 3.4, llamamos a la parte del dominio de elementos finitos Ω_F . Este dominio se discretiza en elementos y sus nodos internos tienen grados de libertad u_I mientras que la superficie de contacto tiene grados de libertad u_S . En general las discretizaciones de las mallas de BEM y FEM pueden tener diferentes número de nodos en la superficie de contacto y por tanto aparecen unas matrices de acople que transforman la información de una de las mallas a otras, denotadas R_u y R_t , y expresamos

$$u_N = R_U u_S, \quad (3.8a)$$

$$F_N(\hat{\mathbf{n}}^*) = R_{tt_s}(\hat{\mathbf{n}}), \quad (3.8b)$$

con $\hat{\mathbf{n}} = -\hat{\mathbf{n}}^*$. Desde un punto de vista físico, lo que estamos haciendo en (3.8b) es imponer que el cuerpo siga estando unido (el campo de desplazamientos debe ser continuo) y que ambos subdominios están en equilibrio. Si escribimos el sistema de ecuaciones resultante para el subdominio discretizado por elementos finitos obtenemos

$$\begin{bmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ K_{SI} & K_{SS} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_I \\ u_S \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_I \\ F_S(\hat{\mathbf{n}}) \end{Bmatrix}, \quad (3.9)$$

en donde $F_S(\hat{\mathbf{n}})$ son las fuerzas nodales en la superficie de contacto. Análogamente, para el subdominio discretizado por BEM obtenemos un sistema de ecuaciones el cual podemos convertir a una

forma fuerza-desplazamiento, haciendo uso de las matrices de acoplamiento ya mencionadas, para llegar a

$$F_N(\hat{\mathbf{n}}^*) = K_{HS}u_S, \quad (3.10)$$

con $F_N(\hat{\mathbf{n}}^*)$ siendo las fuerzas en la superficie de contacto. Acoplando las ecuaciones (3.9) y (3.10) haciendo uso de las condiciones impuesta para los desplazamientos y fuerzas en la superficie de contacto se deduce

$$\begin{bmatrix} K_{II} & K_{IS} \\ K_{SI} & K_{SS} + K_{HS} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} u_I \\ u_S \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} F_I \\ K_{HS}u_S^0 + F_S^0 \end{Bmatrix}. \quad (3.11)$$

Los términos u_S^0 y F_S^0 representan la información del campo incidente en términos de fuerzas y desplazamiento evaluados en la superficie de contacto y K_{HS} describe la contribución del semi-espacio a las ecuaciones de equilibrio global.

Denotando las matrices de Green de tracciones como H^{DBEM} y H^{IBEM} para los métodos directo e indirecto, respectivamente podemos reescribir K_{HS} como

$$K_{HS}^{DBEM} = R_t H^{DBEM} G^{-1} R_U, \quad (3.12a)$$

$$K_{HS}^{IBEM} = R_t G^{-1} H^{DBEM} R_U, \quad (3.12b)$$

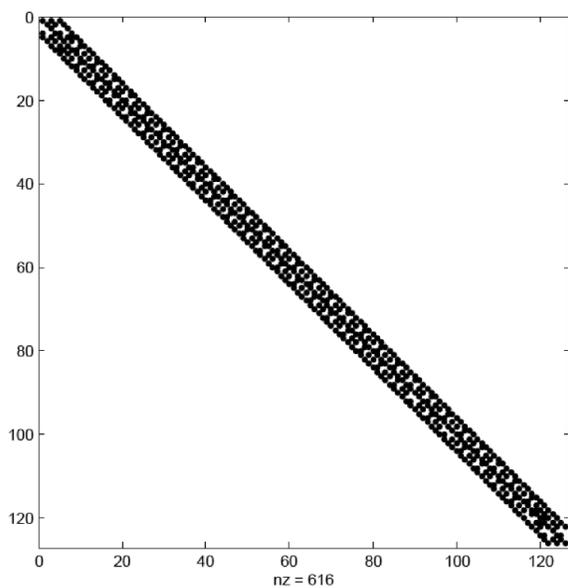
en este caso no existe ninguna diferencia respecto al uso de una formulación directa o indirecta para la solución del problema. Este tipo de ventajas pueden aparecer en el caso de sismología rotacional en donde se busca calcular con mayor precisión las rotaciones, lo cual suele hacerse como diferenciación numérica del campo de desplazamientos, ver [66].

3.3. Compresión de las Matrices de Rigidez

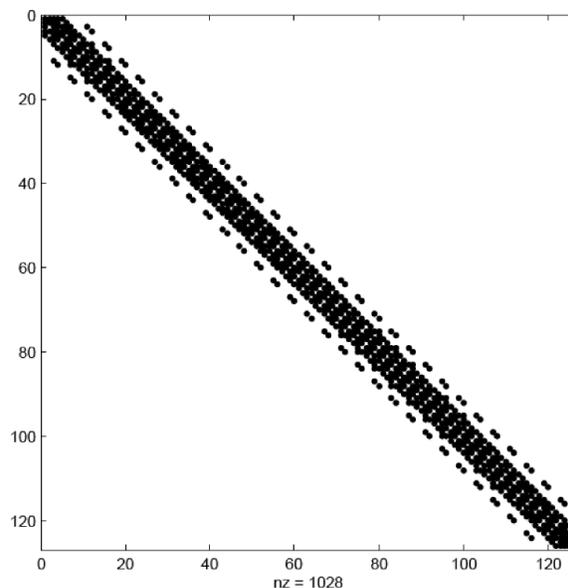
Debido a que BEM usa una representación integral del problema se presenta interacción entre nodos que no están cerca y por tanto las matrices G y H en (3.12b) son densas y por tanto también lo es K_{HS} . Con la idea de aumentar el tamaño de los problemas que se pueden resolver y usar solucionadores iterativos que suelen usarse en la mayoría de códigos comerciales se comprimieron las matrices de rigidez del super-elemento para que quedara en forma bandeda. A pesar de existir diversos trabajos en los que realizan compresiones sobre las matrices en las ecuaciones de BEM no se encontraron trabajos en donde hagan lo mismo con las matrices de rigidez resultantes, que fue lo que se realizó en esta parte del trabajo. Se usaron dos métodos de compresión:

- Método de umbral, en donde todos los términos de la matriz que sean menores a un porcentaje prefijado del máximo valor absoluto se hacen cero;
- Método de semi-ancho de banda, en este caso todos los valores por fuera de un semi-ancho de banda fijado se hacen cero.

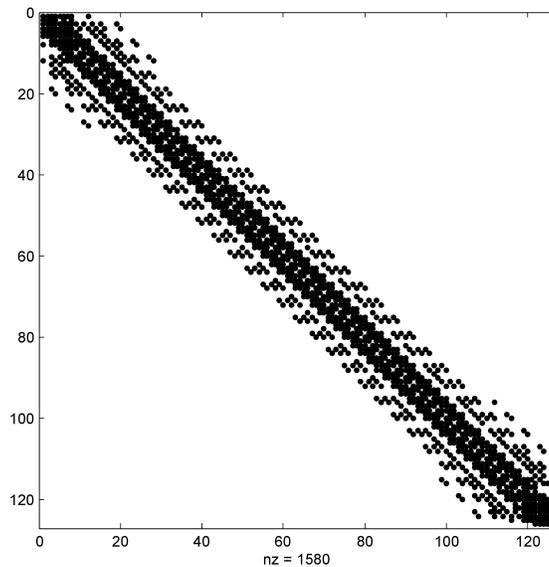
Ambos métodos están basados en la tendencia de las matrices de BEM a ser diagonalmente dominantes debido a las singularidades de las funciones de Green. Sin embargo, el método de umbral es conveniente ya que puede ser aplicado desde una base física, ya que los elementos de las matrices de BEM pueden ser interpretados como coeficientes de influencia indicando qué tan fuerte es el efecto que causa cierta fuente puntual en la respuesta en cierto punto; entonces el umbral seleccionado no es más que un valor que dice hasta qué intensidad deben considerarse estos coeficientes. Esta tendencia de las matrices a ser diagonalmente dominantes puede observarse en la Figura 3.5.



(a) Nivel de umbral = 0.01



(b) Nivel de umbral = 0.001



(c) Nivel de umbral = 0.0001

Figura 3.5. Apariencia de las matrices de rigidez para el cañón semicircular después de aplicar diferentes niveles de umbral. En negro se presentan los valores diferentes de cero.

Capítulo 4

Resultados y Conclusiones

Para evaluar los métodos de compresión en las matrices se resolvieron dos problemas de dispersión clásicos, el del cañón semicircular y el del cañón rectangular. Estos problemas constituyen un escenario poco favorable para el método si interpretamos las matrices resultantes como fronteras absorbentes. La Figura 4.1 presenta una malla esquemática para el cañón semicircular. Como se ve sólo hay una tira de elementos finitos, esto se debe a lo simple de las geometrías tratadas, sin embargo la geometría podría ser muy compleja e incluir tanto heterogeneidades como no-linealidades.

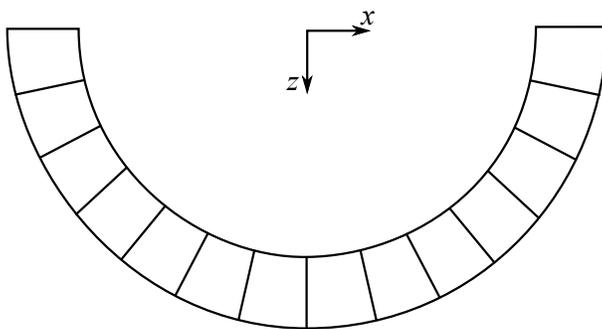


Figura 4.1. Malla esquemática para el cañón semi-circular.

Se evaluó la respuesta de los cañones con las dos geometrías a la incidencia de ondas P y S para ángulos de 0° y 30° medidos respecto al eje vertical. Para la excitación del cañón se hizo incidir una onda plana con una amplitud igual pulso de Ricker. Siguiendo la convención de [67], este pulso tiene la forma

$$f(t) = \frac{\sqrt{\pi} \left(\frac{6t^2}{b^2} - \frac{1}{2} \right) e^{-\frac{6t^2}{b^2}}}{2},$$

y su transformada de Fourier es

$$\hat{f}(\omega) = -\frac{\pi b^3 \omega^2 e^{-\frac{b^2 \omega^2}{24}}}{8 6^{\frac{3}{2}}}.$$

Excitar con este tipo de señal es muy común ya que el espectro de la misma está concentrado alrededor de una sola frecuencia $\frac{2\sqrt{6}}{b}$, como puede verse en la Figura 4.2. Como umbral se tomaron

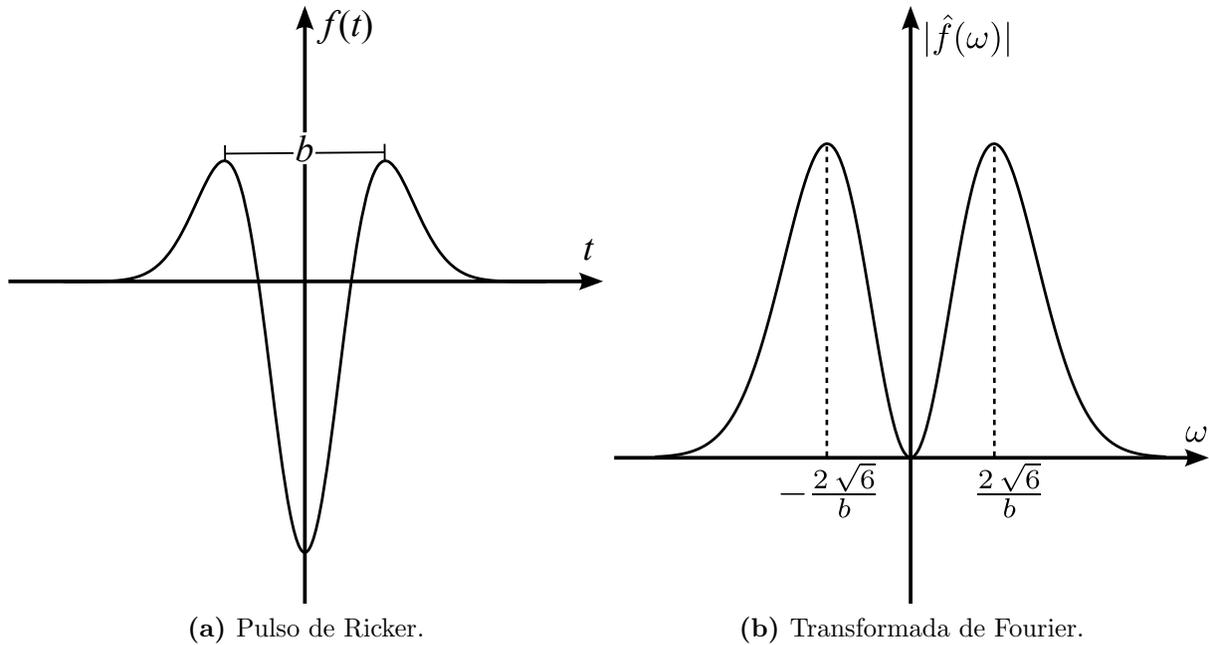


Figura 4.2. Gráfico del pulso de Ricker y su transformada de Fourier.

valores entre 0,0 y 0,01, siendo 0,0 el valor correspondiente a la matriz original y a medida que el valor se hace más grande la aproximación es más pobre. En el caso del criterio del semi-ancho de banda el tamaño del semi-ancho de banda varía entre 0,03 y 1,0, en donde la matriz completa corresponde al valor de 1,0 y el valor de cero a una matriz sólo con términos en la diagonal. El valor para el semi-ancho de banda relativo para las matrices aproximadas con el criterio del umbral se presenta en la Tabla 4.1. Luego de hacer que las matrices sean bandeandas es interesante

Umbral	Semi-ancho de banda relativo	
	Cañón Semi-circular	Cañón Rectangular
0	1	1
10^{-5}	0,26	0,25
10^{-4}	0,13	0,09
10^{-3}	0,06	0,05
10^{-2}	0,03	0,02

Tabla 4.1. Semi-ancho de banda relativo para las matrices comprimidas con el criterio de umbral.

analizar que tantos recursos de almacenamiento tiene estas nuevas matrices resultantes. La matriz original necesita de una memoria de n^2 palabras (tamaño de palabra que depende del tipo de dato usado). Para la matriz aproximada el almacenamiento relativo requerido Rst puede ser aproximado, despreciando las palabras requeridas para almacenar la diagonal, como

$$Rst(Rhbw) = 2Rhbw - Rhbw^2, \quad (4.1)$$

en donde $Rhbw$ es el semi-ancho de banda relativo. Tener un almacenamiento requerido del 50 % de la matriz original es equivalente a tener un semi-ancho de banda relativo de 0,3, mientras que 0,13 sería equivalente a almacenar tan solo el 25 % de la información de la matriz original.

En las Figuras 4.3 a 4.10 se muestran las funciones de transferencia y las historias de los desplazamientos en el tiempo (sismogramas sintéticos) para una frecuencia adimensional de $\eta = \omega L / \pi \beta = 1,0$, en donde ω es la frecuencia angular, β la rapidez de la onda de corte y L es la longitud característica del cañón para los diferentes casos considerados. Los resultados se presentan como funciones de transferencia, en donde el eje x es la posición relativa dentro del cañón y el eje y es la amplificación que tiene la señal en ese lugar específico dentro del cañón. También se presentan resultados en el dominio del tiempo como sismogramas sintéticos, que representan la señal que mediría una estación sismográfica ubicada en el cañón. El pulso de Ricker con el que se hizo la excitación tiene una frecuencia característica igual a η (ver Figura 4.2). La Figura 4.11 presenta los errores relativos respecto a la norma-2 para diferentes niveles de aproximación para todas las ondas incidentes consideradas.

En general, los mejores resultados se obtuvieron para los desplazamientos verticales en el caso de incidencia con onda P y para los desplazamientos horizontales para la incidencia con una onda SV . Adicionalmente, y como se esperaba desde un punto de vista físico, se obtuvieron mejores resultados para el caso del cañón semi-circular pues contiene menos fuentes de difracción que el cañón rectangular, el cual tiene dos discontinuidades en el campo de deformaciones en las esquinas inferiores. Este comportamiento se puede observar para los dos criterios usados, tanto el de umbral como el de semi-ancho de banda.

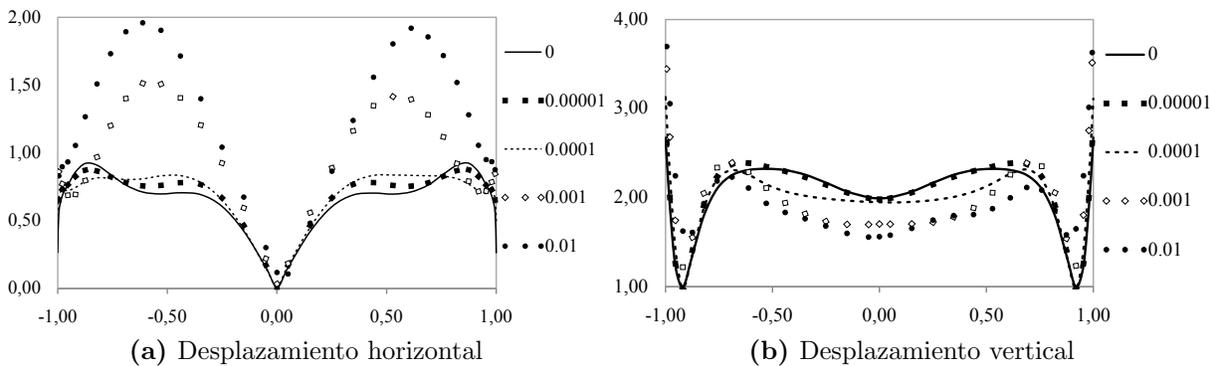


Figura 4.3. Función de transferencia para un cañón semicircular en el caso de una onda P que incide verticalmente para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de umbral.

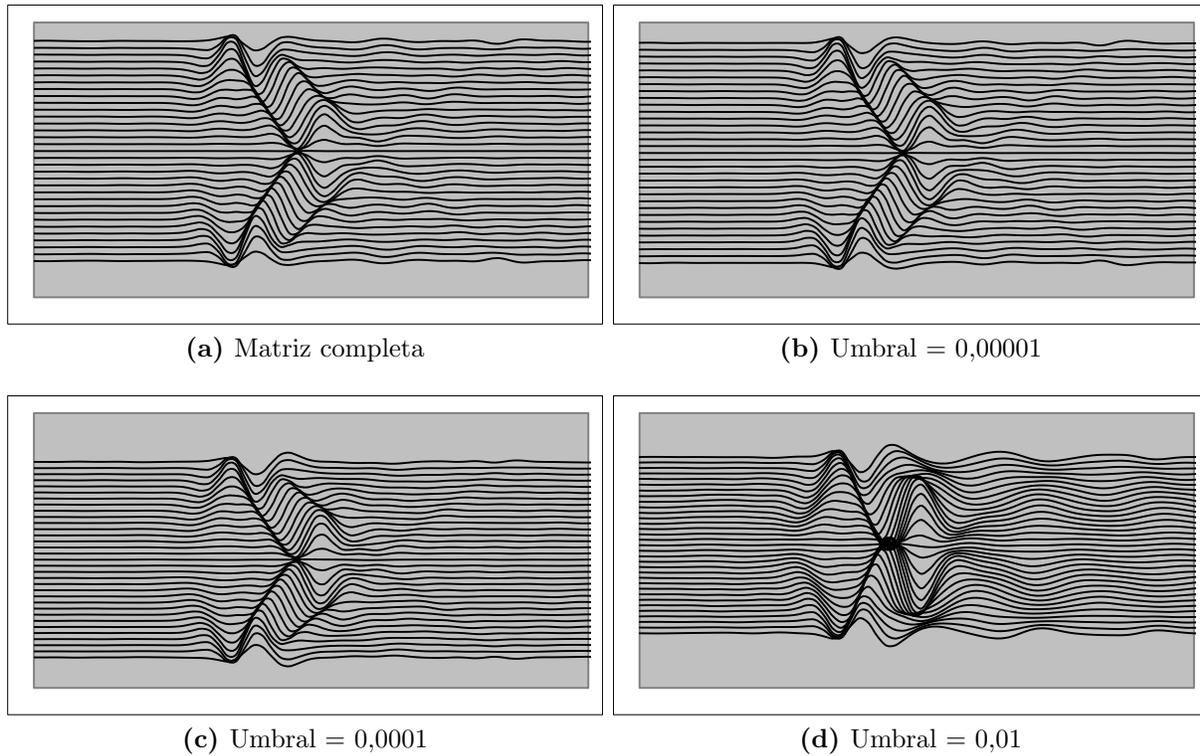


Figura 4.4. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón semicircular para una onda P que incide verticalmente. Se muestran diferentes valores de umbral.

4.1. Conclusiones

Se evaluó un método numérico aproximado para la solución del problema de esparcimiento de ondas elásticas en medio semi-infinitos, con la idea de facilitar el estudio del problema de esparcimiento a un nivel de ingeniería en computadores personales y en arquitecturas ya existentes de elementos finitos. Se evaluó la pérdida de precisión asociada con la compresión de matrices de rigidez completamente densas a matrices bandeadas con dos criterios diferentes. Dichas matrices, son el producto de la discretización de un sub-dominio semi-infinito con un método de elementos en la frontera, p. ej., el método de elementos de frontera directo y el método de elementos de frontera indirecto. Las técnicas propuestas están orientadas a la solución del problema a un nivel ingenieril ya que se llega a matrices de rigidez que pueden ser fácilmente acopladas en códigos de elementos finitos existentes, como ABAQUS o FEAP. El procedimiento de compresión representa un ahorro en memoria además de que facilita el uso de solucionadores iterativos, comúnmente usados en programas de elementos finitos comerciales. A pesar de existir en la literatura procedimientos similares para la compresión de matrices de BEM, no se conocen resultados publicados para la compresión en algoritmo acoplados FEM/BEM. Se obtuvo buenos niveles de aproximación para desplazamientos verticales en el caso de incidencia de ondas P y para desplazamientos horizontales en el caso de incidencia de ondas SV . Se presentaron errores mayores para el cañón rectangular

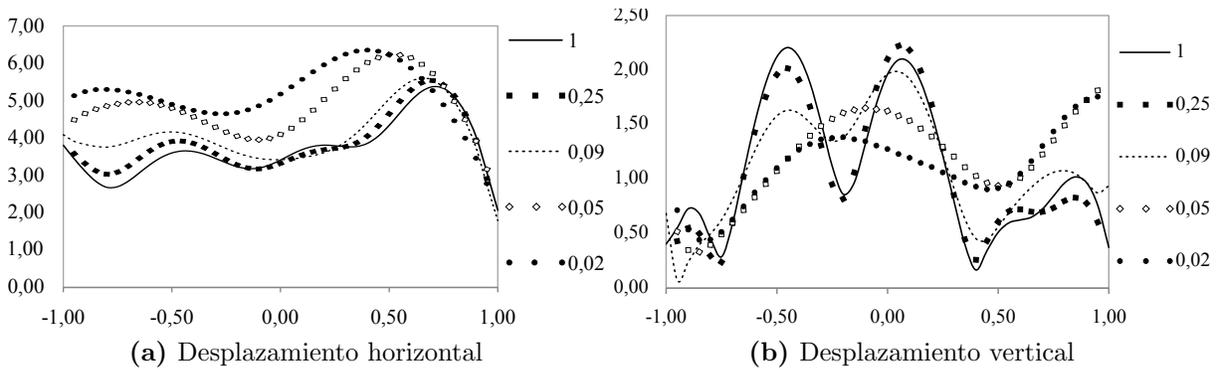


Figura 4.5. Función de transferencia para un cañón rectangular en el caso de una onda *SV* que incide a 30° para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de umbral.

debido a la presencia de puntos de singularidad en el campo de tracciones en las esquinas inferiores. Se encontraron errores por debajo del 50 % para los rangos de aproximación tratados, para un error del 10 % corresponde un semi-ancho de banda de 0,13 lo que implica un almacenamiento de 0,25, o equivalentemente un ahorro en memoria del 75 %.

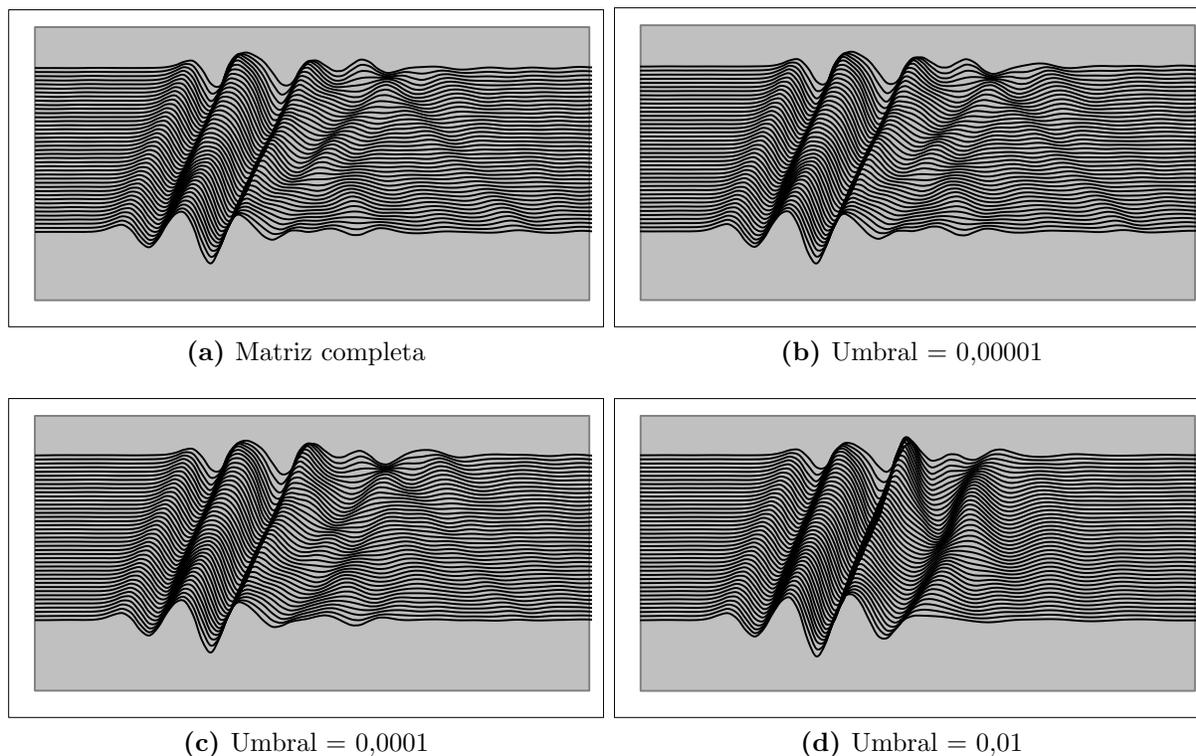


Figura 4.6. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón rectangular para una onda *SV* que incide a 30° . Se muestran diferentes valores de umbral.

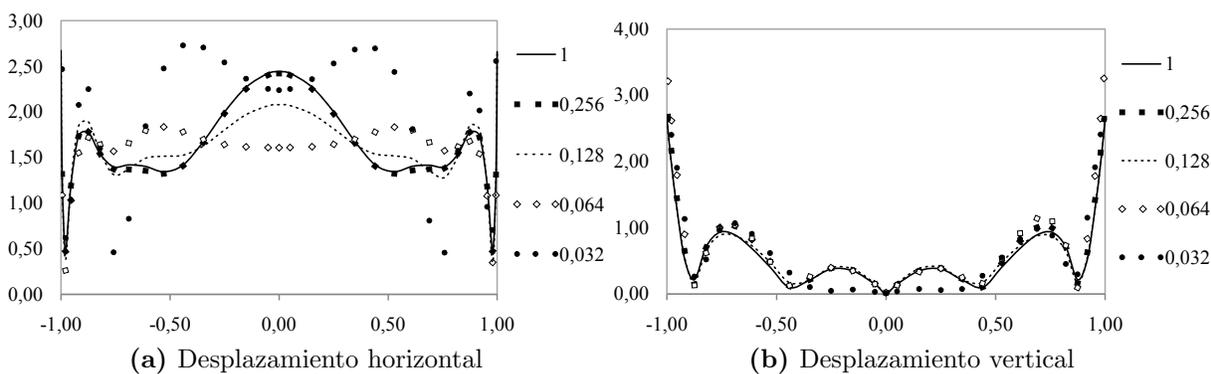


Figura 4.7. Función de transferencia para un cañón semicircular en el caso de una onda *SV* que incide verticalmente para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de semi-ancho de banda.

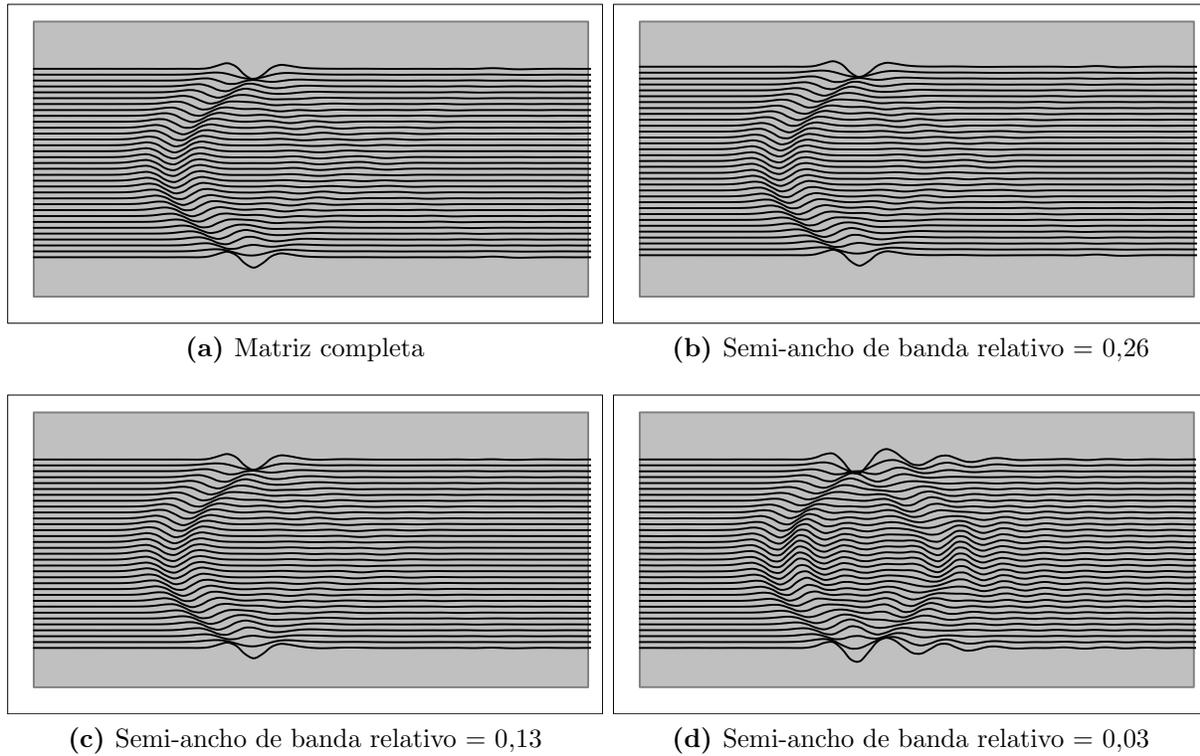


Figura 4.8. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón semicircular para una onda SV que incide verticalmente. Se muestran diferentes valores de semi-ancho de banda.

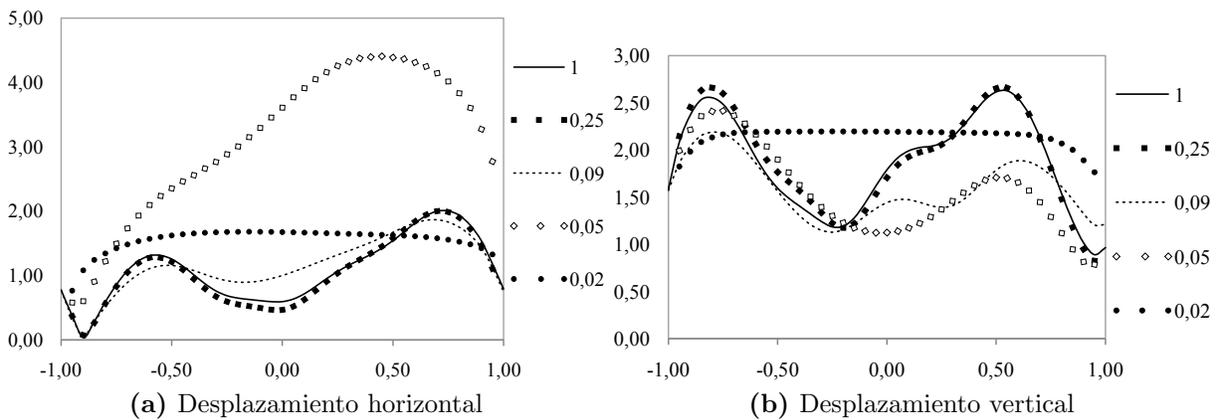


Figura 4.9. Función de transferencia para un cañón semicircular en el caso de una onda P que incide a 30° para una frecuencia adimensional de 1, se usó el criterio de semi-ancho de banda.

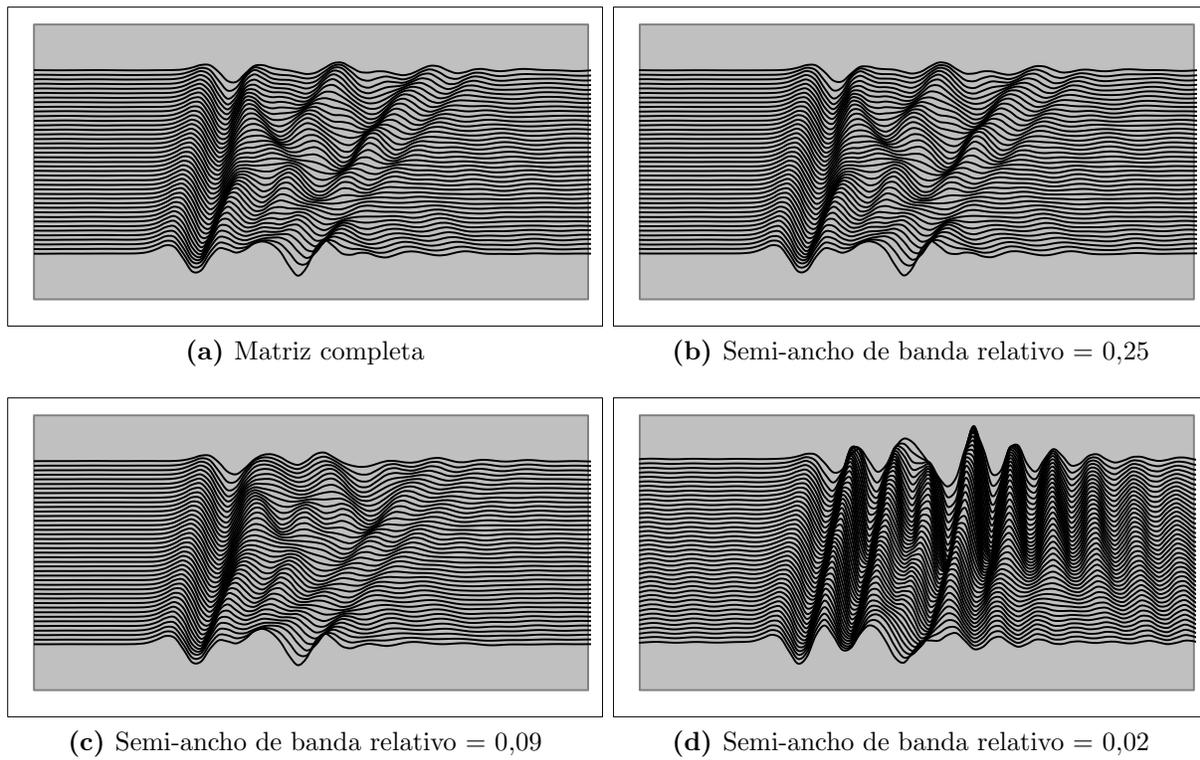


Figura 4.10. Sismogramas sintéticos para los desplazamientos horizontales en un cañón semi-circular para una onda P que incide a 30° . Se muestran diferentes valores de semi-ancho de banda.

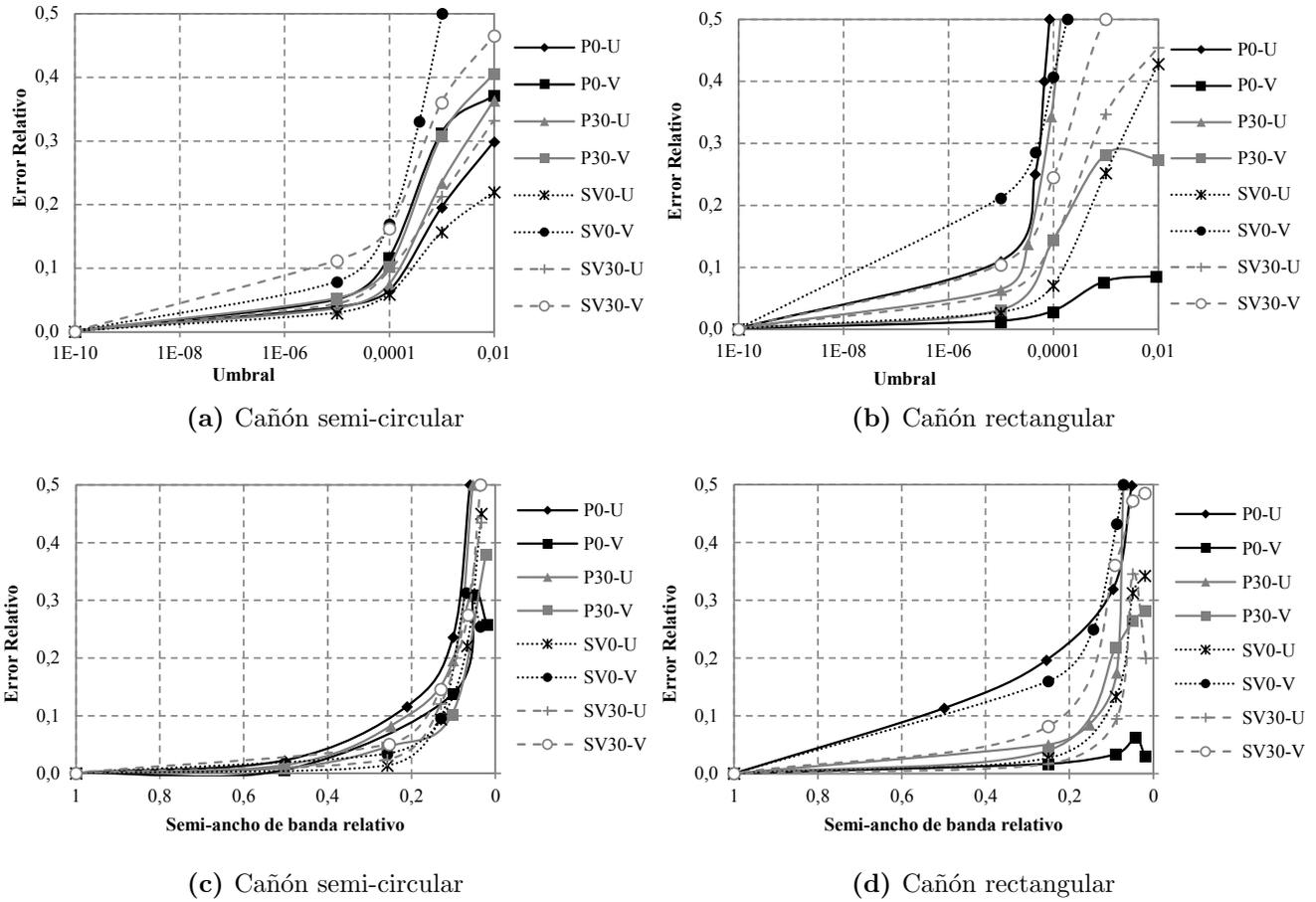


Figura 4.11. Comparación de los diferentes criterios de compresión. Arriba, criterio de umbral, y abajo, criterio de semi-ancho de banda. En todos los casos las geometrías y el ángulo de incidencia se varió como se mencionó anteriormente. El error se calculó para las funciones de transferencia para la frecuencia adimensional de 1.

Parte II

Ondas en Medios Infinitos: Dispersión en Materiales Periódicos

Capítulo 5

Estado del Arte

Esta parte del documento se refiere al desarrollo de una herramienta para encontrar las curvas de dispersión en materiales periódicos usando FEM. La metodología implementada se basa en el teorema de Bloch para encontrar el comportamiento del material entero modelando una única celda. La propagación de ondas mecánicas en materiales periódicos tiene aplicaciones en el tratamiento de señales médicas para el diagnóstico no invasivo [69], en acústica submarina en el diseño de recubrimientos absorbentes en el ultrasonido [70]. Además también tiene aplicaciones potenciales en el caso de ensayos no destructivos y diagnóstico en sitio, en donde heterogeneidades de cierta longitud característica quieren ser detectada pero los modelos clásicos no son suficientes. Otra área que ha motivado el estudio de la propagación de ondas en materiales celulares es el de los metamateriales [71, 72], que son materiales con propiedades que no se encuentran en la naturaleza como un coeficiente de Poisson negativo [73], o un módulo de compresibilidad negativo [74].

Los materiales sólidos son heterogéneos a escalas pequeñas. La hipótesis de continuo es válida si los campos de esfuerzos y deformaciones varían suavemente en comparación con las escalas microestructurales existentes. En algunos casos esta hipótesis no es válida y se pueden presentar fuertes gradientes de esfuerzos (y deformaciones) cerca de grietas, por ejemplo. Este comportamiento es más notorio en los problemas de propagación de ondas a altas frecuencias en donde las longitudes de onda pueden interactuar con la microestructura dando lugar a un comportamiento de micro-esparsamiento. Esta respuesta puede observarse en el laboratorio gracias al carácter dispersivo de la propagación. No obstante, estos efectos no pueden ser capturados directamente con modelos basados en el continuo clásico.

Los problemas de propagación de ondas pueden tratarse con tres tipos de modelos (ver Figura 5.1):

- Mecánica del Continuo.

- Física del Estado Sólido.
- Física Estadística.

En el primer grupo se asume que el sólido es un conjunto de puntos materiales en donde las propiedades y variables relacionadas son tratadas como funciones continuas de la posición. La teoría del continuo clásico está bien establecida y existe una amplia variedad de software numérico comercial para resolver los problemas de valores en la frontera resultantes. En el caso de problemas con materiales heterogéneos enfrentados con el continuo clásico, al modelo se le asignan unas propiedades del material efectivas. Sin embargo, estos modelos no tienen la capacidad de capturar efectos dispersivos ya que la cinemática es la correspondiente a un cuerpo homogéneo. Aunque se han introducido efectos dispersivos en aproximaciones desde el continuo clásico a través de propiedades viscoelásticas en el factor de calidad Q estas propuestas son empíricas. En el caso de continuos de Cosserat los puntos materiales tienen grados de libertad de rotación adicionales. Esto afecta el comportamiento cinemático del modelo, permite la aparición de nuevos tipos de ondas, y cambia aquellas existentes en el caso clásico. En la propagación de ondas estos modelos han sido tratados principalmente con propiedades efectivas obtenidas a través de un promedio espacial (homogenización). Diebels et al (2005) [75] propusieron una técnica de homogenización a un continuo de Cosserat denominada FE^2 (Elementos Finitos en dos niveles) para la simulación del comportamiento multiescala de espumas, en donde consideraron un modelo de vigas en la escala micro. Similarmente Jänicke (2011) [76, 77] obtuvo relaciones de dispersión para un sólido de Cosserat usando una técnica de homogenización. Otra alternativa es el uso de modelos no-locales en donde la respuesta del punto material depende del comportamiento de un conjunto de puntos en un volumen; la contribución de cada punto se considera con relaciones integrales usando unas funciones kernel. La formulación de la función kernel apropiada es un proceso arbitrario convirtiendo el método en cierta medida en algo empírico, ver Eringen (2002) [78]. Un trabajo reciente en esta línea ha sido realizado por Challamel et al (2009) [79] quienes presentan efectos dispersivos en sólidos usando un modelo no-local y comparan sus resultados con otros obtenidos usando dinámica de redes cristalinas. De igual forma Artan y Altan (2002) [80] usaron modelos de elasticidad no-local para simular la propagación de ondas SV en un medio estratificado con una distribución de capas periódica.

En un segundo grupo se utilizan conceptos de la física del estado sólido como celdas unitarias, funciones de Bloch, y zonas de Brillouin para describir las ondas en el sólido; ver Kittel (1996) [81]. El campo de desplazamientos se asume *periódico* en las celdas de la red y al interior de cada celda el sólido es tratado como un continuo. Ruzzene et al (2003) [82] modelaron estructuras de panales de abeja y panales de abeja con ángulos re-entrantes, este último exhibe un módulo de Poisson negativo a nivel macro, con la idea de encontrar la direccionalidad de la estructura –la cual puede ser usada como un filtro acústico–. Srikantha et al (2006) [83] estudiaron el comportamiento dispersivo de cuatro microestructuras: triangular, panales de abeja cuadrados y hexagonales, y red de kagome. Ellos mostraron, además, que las ramas presentes en las curvas de dispersión están relacionadas de cierta forma con los modos de vibración de la celda. Aberg y Gudmunson (1997) [84] realizaron simulaciones de materiales con microestructura periódica en el software

Abaqus[®] usando una representación real de las matrices, doblando el número de grados de libertad del modelo; usaron esta técnica para obtener las curvas de dispersión para un compuesto con fibras hexagonales. Las condiciones de Bloch no permiten capturar defectos en la red. Sin embargo si se toma una supercelda (formada por muchas celdas) y se imponen condiciones de Born-von Kármán (periodicidad) [85], estos efectos pueden tenerse en cuenta. Takahashi y Suto (1950) [86,87] usaron las condiciones de Born-von Kármán para modelizar la propagación de ondas en materiales granulares (p. ej. arenas). Más recientemente Riccardi et al (2009) usaron las condiciones de Born-von Kármán para simular las vibraciones de una red hecha de cadenas de proteínas [88]. Lee et al [89] modelizaron la estructura de bandas de un superconductor basado en hierro usando las mismas condiciones de frontera.

En un tercer grupo se pueden identificar las técnicas que describen el sólido a través de la mecánica estadística. Dentro de este grupo están los Métodos de Lattice-Boltzmann (LB) que han sido más usados en la mecánica de fluidos y tienen una motivación adicional en la creciente capacidad de las GPU. Luthi (1998) [90] presenta una propuesta para estudiar ondas de radio y propagación de fracturas usando LB. Una estrategia de LB para tratar ondas de choque en sólidos puede verse en Xiao (2007) [91]. Nabovati (2011) [92] desarrolló una metodología LB para el transporte de fonones en materiales cristalinos. Otro grupo de técnicas basadas en la física estadística es el de simulaciones atomísticas en donde el sólido es tratado como un conjunto de partículas discretas. Tadmor et al(1996) presentan una formulación mixta continuo-atomística para la deformación de sólidos en donde las relaciones constitutivas se remplazan por interacciones atomísticas; con esta aproximación se estudió el problema de nanoindentación. Weinan y Huang (2002) [93] usaron una formulación mixta Dinámica Molecular-Continuo para simular el comportamiento de redes cristalinas con defectos y para describir la mecánica de la interfaz entre dos sólidos.

En el contexto local, el Grupo de Mecánica Aplicada de la Universidad EAFIT ha trabajado los últimos 6 años tanto en problemas de propagación de ondas como en el estudio de teorías del continuo no-clásicas usando simulaciones numéricas. Se han usado diferentes métodos como: FEM, BEM y métodos híbridos; una revisión de diferentes alternativas para estudiar el problema de esparcimiento de ondas puede verse en Gómez et al (2010) [17]. Más recientemente Guarín y Gómez (2011) [94] trabajaron en métodos para comprimir las matrices de rigidez resultantes de algoritmos acoplados FEM-BEM para manejar las condiciones de radiación en dominios semi-infinitos. En el campo de modelos de Cosserat el grupo ha trabajado en diversos problemas con idea de capturar diferentes efectos microestructurales. Por ejemplo, una versión de la teoría reducida de las ecuaciones de Cosserat se implementó usando un esquema de integración reducida con funciones de penalización en Gómez (2008) [95] para capturar efectos de plasticidad de gradiente. Vélez y Gómez (2011) [96] han trabajado en una comparación entre la versiones de Cosserat reducido y Cosserat completo para clarificar cuál modelo funciona mejor para una aplicación dada. Finalmente, Gómez et al (2011) [97] presentan una implementación de propagación de ondas para sólidos de Cosserat semi-infinitos en donde la idea es capturar el comportamiento dispersivo del medio. El Grupo de Lógica y Computación de la misma universidad ha realizado trabajos en el campo de la Física del Estado Sólido, Gutiérrez encontró las características de dispersión para un cristal fotónico bi-dimensional haciendo uso del Método de Expansión en Ondas Planas [98]. Villegas [99]

simuló efectos de confinamiento en el grafeno, la cual es una estructura periódica bidimensional formada por carbono, usando el método de operador de separación con transformada rápida de fourier (FFT-SOM) con aproximación *Tight Binding* de los potenciales atómicos y condiciones de Bloch sobre las funciones de onda.

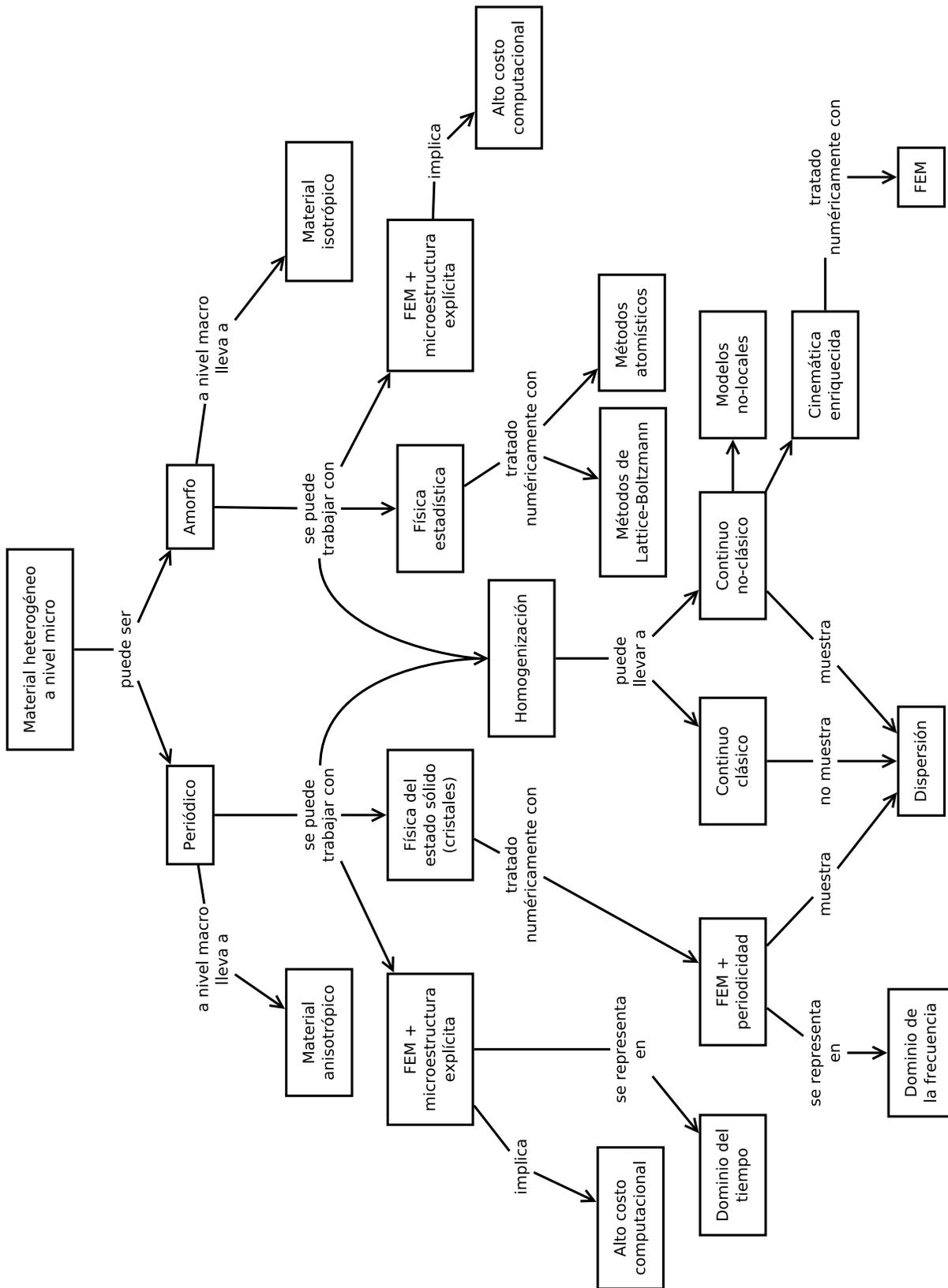


Figura 5.1. Alternativas para estudiar sólidos con microestructura

Capítulo 6

Propagación de Ondas en un Material Periódico

Un material periódico se define como la repetición de un motivo dado en una, dos o tres de las direcciones del espacio. El motivo se refiere a una heterogeneidad a nivel microestructural y puede contener diversos materiales con diferentes geometrías. Los materiales, a su vez, pueden ser sólidos o fluidos.

Un material de este tipo está completamente descrito por una red y una unidad elemental, que se denomina *celda elemental*. La red está definida por unos vectores base, y la dimensión de esta base es el número de direcciones de la periodicidad. Estos vectores se denominan *vectores base* de la red, y permiten construir el material periódico completo aplicando operaciones de traslación sucesivas [100]. Para un material periódico en las tres direcciones del espacio, denominado material periódico 3D, denotaremos los vectores base como \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 y \mathbf{a}_3 (ver Figura 6.1). En el caso de una periodicidad 2D se puede tener un material que es infinito o finito en la tercera dimensión (ver Figura 6.2), en este caso los vectores base se denotan \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 . También puede tenerse un material que es periódico en una dirección, denominado material periódico 1D, y éste puede tener dos de sus dimensiones finitas o infinitas.

6.1. Teorema de Bloch

Partamos de una ecuación de la forma

$$Lu(\mathbf{x}) = \omega^2 u(\mathbf{x}) \ , \tag{6.1}$$

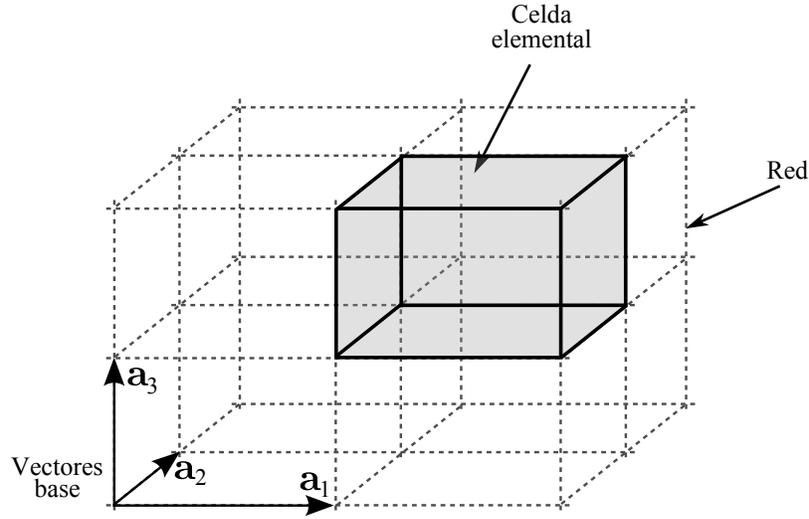


Figura 6.1. Descripción de un material periódico en 3D

en donde L es un operador diferencial con propiedades algebraicas similares a la ecuación de onda. El teorema de Bloch establece que la solución para (6.1) es

$$u(\mathbf{x}) = w(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad , \quad (6.2)$$

en donde $w(\mathbf{x})$ es una función con la misma periodicidad del material y comúnmente se llama función de Bloch. El teorema de Bloch según [81] establece

Las funciones características de la ecuación de onda para un potencial periódico son el producto entre una onda plana $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x})$ y una función $w(\mathbf{x})$ con la misma periodicidad de la red del cristal.

Si escribimos la solución (6.2) para el punto $\mathbf{x} + \mathbf{a}$ obtenemos

$$u(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = w(\mathbf{x} + \mathbf{a})e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{a})} \quad ,$$

siendo $\mathbf{a} = n_i\mathbf{a}_i$ un vector de periodicidad de la red, y $n_i \in \mathbb{Z}$. Como $w(\mathbf{x})$ debe tener la misma periodicidad que la red

$$u(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = w(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{a})} \quad ,$$

lo que implica

$$w(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = u(\mathbf{x})e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}+\mathbf{a})} \quad ,$$

y reemplazando esto en (6.2) se llega a

$$u(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = u(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} \quad . \quad (6.3)$$

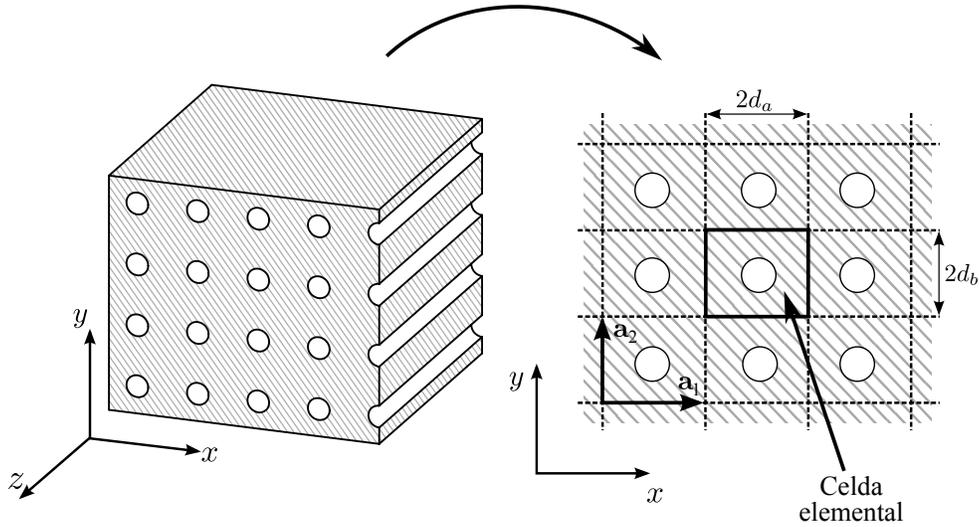


Figura 6.2. Descripción de un material periódico en 2D

La ecuación (6.3) se denomina una condición de periodicidad de Bloch o de Bloch-periodicidad. Además de la forma presentada en la ecuación (6.1), podríamos tener una ecuación de la forma

$$Lu(\mathbf{x}) = \omega^2 u(\mathbf{x}) + \mathbf{f}(\omega) , \quad (6.4)$$

en donde $\mathbf{f}(\omega)$ es una fuerza de cuerpo armónica con frecuencia ω que tiene la misma periodicidad que la celda, ver [15].

6.1.1. Teorema de Bloch en Elastodinámica

Consideremos la propagación de ondas en un material elástico, lineal e isotrópico. La cual podemos describir mediante la ecuación de Navier-Cauchy en el dominio de la frecuencia (despreciando fuerzas de cuerpo)

$$(\lambda + \mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) = -\omega^2 \rho \mathbf{u} .$$

El vector de desplazamientos puede expresarse como $\mathbf{u} = \nabla\varphi + \nabla \times \boldsymbol{\psi}$ gracias al teorema de descomposición de Helmholtz [5, 35], y los potenciales $\varphi, \boldsymbol{\psi}$ son el potencial escalar y vectorial, respectivamente. Estos potenciales verifican

$$\begin{aligned} \nabla^2 \varphi &= -\frac{\omega^2}{\alpha^2} \varphi , \\ \nabla^2 \boldsymbol{\psi} &= -\frac{\omega^2}{\beta^2} \boldsymbol{\psi} , \end{aligned}$$

donde α, β son las rapidezces de las ondas longitudinal y transversal, respectivamente.

Y como las ecuaciones para los potenciales $\varphi, \boldsymbol{\psi}$ son ecuaciones de onda se verifica el teorema de Bloch y por tanto

$$\begin{aligned}\varphi(\mathbf{x}) &= \varphi(\mathbf{x} + \mathbf{a})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}, \\ \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) &= \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x} + \mathbf{a})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}},\end{aligned}$$

y

$$\begin{aligned}\mathbf{u}(\mathbf{x}) &= \nabla\varphi(\mathbf{x}) + \nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\nabla\varphi(\mathbf{x}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x}), \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}[\nabla\varphi(\mathbf{x}) + \nabla \times \boldsymbol{\psi}(\mathbf{x})] = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}).\end{aligned}$$

Y por tanto el teorema de Bloch se satisface para el caso del campo de desplazamientos, i.e.

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}\mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}).$$

6.2. Teorema de Bloch como Condición de Frontera

Si partimos de la ecuación reducida de onda [1] el problema de valores en la frontera estaría dado por

$$\begin{aligned}(\lambda + 2\mu)\nabla(\nabla \cdot \mathbf{u}) + \mu\nabla \times (\nabla \times \mathbf{u}) &= -\omega^2\rho\mathbf{u} && \text{en } \Omega, \\ \mathbf{u}(\mathbf{x} + \mathbf{a}) &= \mathbf{u}(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} && \text{en } \Gamma, \\ \mathbf{t}(\mathbf{x} + \mathbf{a}) &= -\mathbf{t}(\mathbf{x})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} && \text{en } \Gamma.\end{aligned}$$

A este tipo de condiciones de frontera las denominaremos *condiciones de Bloch-periodicidad*. El operador de esta ecuación en derivadas parciales es autoadjunto y positivo para las condiciones de Bloch-periodicidad [12, 101], y por tanto los valores propios son positivos. Luego de discretizar este problema por FEM las matrices resultantes son hermiticas y definidas positivas. Esto está en concordancia con el hecho de que la energía total del sistema deba ser siempre mayor que cero y que los valores propios (frecuencias al cuadrado) deban ser todas positivas.

El problema puede formularse de manera equivalente para la función de Bloch $\mathbf{w}(\mathbf{x})$ en donde las condiciones de Bloch-periodicidad pueden ser remplazadas por condiciones de periodicidad simples [102]. El Problema de Valores en la Frontera equivalente sería

$$\begin{aligned}B\mathbf{w} &= -\omega^2\rho\mathbf{w} && \text{en } \Omega, \\ \mathbf{w}(\mathbf{x} + \mathbf{a}) &= \mathbf{w}(\mathbf{x}) && \text{en } \Gamma, \\ \frac{\partial\mathbf{w}}{\partial\hat{\mathbf{n}}}(\mathbf{x} + \mathbf{a}) &= \frac{\partial\mathbf{w}}{\partial\hat{\mathbf{n}}}(\mathbf{x}) && \text{en } \Gamma,\end{aligned}$$

en donde B es el operador

$$B = (\lambda + \mu)[\nabla\nabla \cdot + i\{\mathbf{k}\nabla \cdot + \mathbf{k} \cdot \nabla + \mathbf{k} \times \nabla \times\}]() - \mu[\nabla^2 + 2i\mathbf{k} \cdot \nabla - \|\mathbf{k}\|^2]() .$$

6.3. Forma Variacional para Elastodinámica con condiciones de Bloch

Partamos de la ecuación de momento en el dominio de la frecuencia

$$\sigma_{rs,s} + f_r(\omega) = -\rho\omega^2 u_r, \text{ en } \Omega,$$

en donde f_r es una fuerza armónica en la dirección r , $\sigma_{rs} = C_{rskl}\epsilon_{kl}$ y $\epsilon_{kl} = 1/2(u_{k,l} + u_{l,k})$. Las condiciones frontera son

$$u_r(x_s + a_s) = u_r(x_s)e^{ik_s a_s} \text{ en } \Gamma, \quad (6.5a)$$

$$t_r(x_s + a_s) = -t_r(x_s)e^{ik_s a_s} \text{ en } \Gamma, \quad (6.5b)$$

siendo t_r tracciones sobre la superficie de la celda.

Ahora, multiplicamos la ecuación de momento por el complejo conjugado de una función arbitraria v_r e integramos sobre el dominio¹

$$\int_{\Omega} v_r^* [\sigma_{rs,s} + f_r(\omega)] d\Omega = -\omega^2 \int_{\Omega} \rho v_r^* u_r d\Omega ,$$

el complejo conjugado es denotado por $*$. Haciendo uso de la relación constitutiva

$$\int_{\Omega} v_r^* C_{rskl} \epsilon_{kl,s} d\Omega + \int_{\Omega} v_r^* f_r d\Omega = -\omega^2 \int_{\Omega} \rho v_r^* u_r d\Omega ,$$

y usando el teorema de la divergencia

$$- \int_{\Omega} v_r, s^* C_{rskl} \epsilon_{kl} d\Omega + \int_{\Omega} v_r^* t_r(n_s) d\Gamma + \int_{\Omega} v_r^* f_r d\Omega = -\omega^2 \int_{\Omega} \rho v_r^* u_r d\Omega ,$$

con $t_r^{n_s} = C_{rskl} \epsilon_{kl} n_s$, si tomamos $v_r = u_r$ y tenemos en cuenta que el tensor ϵ_{rs} es simétrico se obtiene

$$- \int_{\Omega} \epsilon_{rs} C_{rskl} \epsilon_{kl} d\Omega + \int_{\Gamma} u_r^* t_r(n_s) d\Gamma + \int_{\Omega} u_r^* f_r(\omega) d\Omega = -\omega^2 \int_{\Omega} \rho u_r^* u_r d\Omega .$$

Y despreciando las fuerzas de cuerpo, el Funcional de Energía para este problema sería

$$\Pi(\omega) = \int_{\Omega} \epsilon_{rs}^*(\mathbf{x}) C_{rskl}(\mathbf{x}) \epsilon_{kl}(\mathbf{x}) d\Omega - \omega^2 \int_{\Omega} \rho(\mathbf{x}) u_r^*(\mathbf{x}) u_r(\mathbf{x}) d\Omega - \int_{\Gamma} u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x}) d\Gamma . \quad (6.6)$$

¹Comúnmente, en la deducción de las formas débiles en FEM se multiplica por una función arbitraria v_r que es real. En este caso la función es compleja y para poder verificar las propiedades de producto interior que deben satisfacer las funciones para garantizar algunas bondades matemáticas debe multiplicarse por su complejo conjugado, ver por ejemplo [5, 103].

El primer término en la ecuación (6.6) es la energía de deformación al interior del dominio, el segundo término corresponde a la energía cinética para un movimiento armónico con frecuencia angular ω , el último término corresponde a la energía de deformación en la frontera del dominio. El término de la frontera está relacionado con la imposición de las condiciones de frontera naturales (de Neumann) en la formulación de FEM. En este caso particular las condiciones de Bloch-periodicidad para las fuerzas estarán satisfechas de manera implícita en la forma variacional, como veremos con más detalle. Ya que el dominio es una única celda de una red que debe formar un teselado², las fronteras pueden agruparse por pares, es decir, cada lado (*lado de referencia*) debe tener un lado opuesto (*lado imagen*), y por tanto el último término en (6.6) puede escribirse como

$$\int_{\Gamma} u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x}) d\Gamma = \sum_l \int_{\Gamma_l} [u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x}) + u_r^*(\mathbf{x} + \mathbf{a}_l) t_r(\mathbf{x} + \mathbf{a}_l)] d\Gamma ,$$

en donde el índice l se refiere a cada uno de los pares de lados opuestos en la frontera. Por tanto

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma} u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x}) d\Gamma &= \sum_l \int_{\Gamma_l} [u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x}) + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_l} u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x} + \mathbf{a}_l)] d\Gamma , \\ \int_{\Gamma} u_r^*(\mathbf{x}) t_r(\mathbf{x}) d\Gamma &= \sum_l \int_{\Gamma_l} u_r^*(\mathbf{x}) [t_r(\mathbf{x}) + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_l} t_r(\mathbf{x} + \mathbf{a}_l)] d\Gamma , \end{aligned}$$

y la expresión en corchetes es la condición (6.5b), y por tanto igual a cero. Esta forma variacional puede plantearse para otros operadores que tengan propiedades algebraicas similares a una ecuación de onda y que sean positivos definidos [12, 101, 104].

6.4. Bloch-periodicidad en FEM

Las condiciones de Bloch-periodicidad en un problema de Elementos Finitos o, de manera más general, en un problema discreto pueden plantearse como una serie de relaciones entre los grados de libertad de lados opuestos para una celda unitaria.

²Un teselado es un patrón regular que cubre todo el espacio sin dejar zonas espaciadas/huecos y en el que no se deben superponer las figuras.

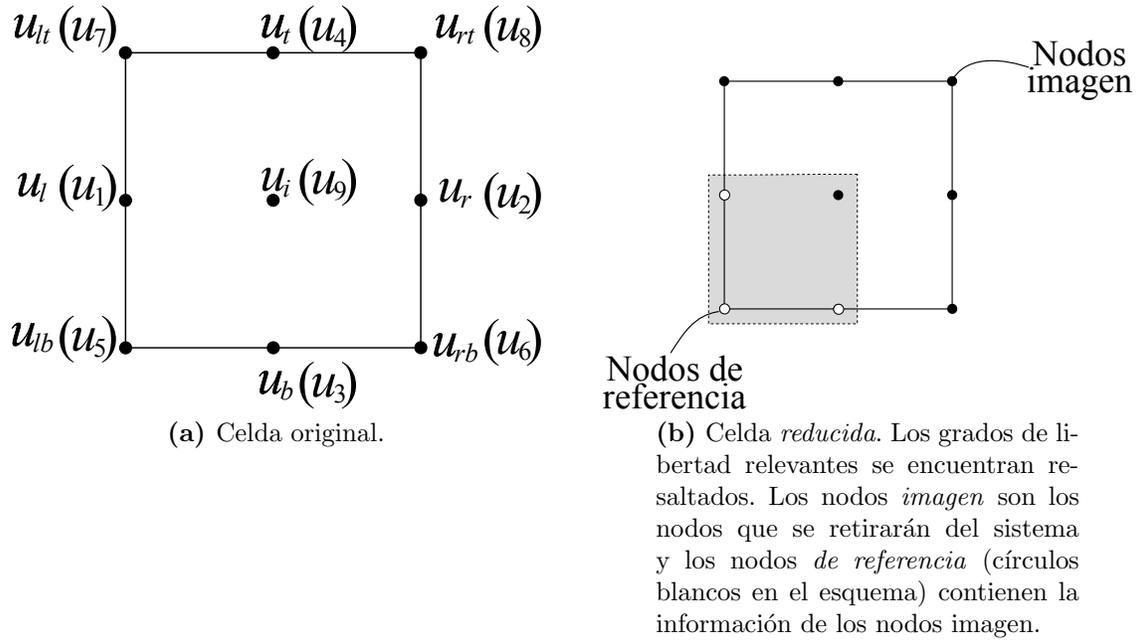


Figura 6.3. Celda unitaria con rótulos para los grupos de grados de libertad

Partamos del problema original

$$[K - \omega^2 M]\{u\} = \{f\} , \quad (6.7)$$

en donde

$$u = [u_l \ u_r \ u_b \ u_t \ u_{lb} \ u_{rb} \ u_{lt} \ u_{rt} \ u_i]^T = [u_1 \ u_2 \ u_3 \ u_4 \ u_5 \ u_6 \ u_7 \ u_8 \ u_9]^T ,$$

$$f = [f_l \ f_r \ f_b \ f_t \ f_{lb} \ f_{rb} \ f_{lt} \ f_{rt} \ f_i]^T = [f_1 \ f_2 \ f_3 \ f_4 \ f_5 \ f_6 \ f_7 \ f_8 \ f_9]^T ,$$

los subíndices están descritos en al Figura 6.3.

Del teorema de Bloch sabemos que

$$u_2 = e^{i\psi_x} u_1, \quad u_4 = e^{i\psi_y} u_3, \quad u_6 = e^{i\psi_x} u_5,$$

$$u_7 = e^{i\psi_y} u_5, \quad u_8 = e^{i(\psi_x + \psi_y)} u_5,$$

con $\psi_x = 2k_x d_a$ y $\psi_y = 2k_y d_b$ los saltos de fase en x y en y , respectivamente y $(k_x, k_y) = \mathbf{k}$ el vector de onda. Si pensamos las relaciones anteriores como parte de una transformación lineal podemos

escribir

$$\underbrace{\begin{Bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \\ u_5 \\ u_6 \\ u_7 \\ u_8 \\ u_9 \end{Bmatrix}}_u = \underbrace{\begin{bmatrix} I_{nl} & 0 & 0 & 0 \\ I_{nl}e^{i\psi_x} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & I_{nb} & 0 & 0 \\ 0 & I_{nb}e^{i\psi_y} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_2 & 0 \\ 0 & 0 & I_2e^{i\psi_x} & 0 \\ 0 & 0 & I_2e^{i\psi_y} & 0 \\ 0 & 0 & I_2e^{i(\psi_x+\psi_y)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & I_{ni} \end{bmatrix}}_T \underbrace{\begin{Bmatrix} u_1 \\ u_3 \\ u_5 \\ u_9 \end{Bmatrix}}_{u_R}, \quad (6.8)$$

siendo I_n matrices identidad de tamaño n igual al número de grados de libertad asociado con el grupo respectivo. Podemos escribir la ecuación (6.8) en forma compacta como $u = Tu_R$ y reemplazando (6.8) en (6.7) obtenemos

$$[KT]u_R = \omega^2[MT]u_R. \quad (6.9)$$

Del teorema de Bloch tenemos, además, las siguientes condiciones de equilibrio

$$\begin{aligned} f_2 + e^{i\psi_x} f_1 &= 0, & f_4 + e^{i\psi_y} f_3 &= 0, \\ f_8 + e^{i\psi_x} f_6 + e^{i\psi_y} f_7 + e^{i(\psi_x+\psi_y)} f_5 &= 0. \end{aligned}$$

Y si pensamos estas relaciones como otra transformación lineal podríamos escribir

$$\underbrace{\begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ f_9 \end{Bmatrix}}_{f_R} = \underbrace{\begin{bmatrix} I_{nl} & I_{nl}e^{-i\psi_x} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & I_{nb} & I_{nb}e^{-i\psi_y} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & I_2 & I_2e^{-i\psi_x} & I_2e^{-i\psi_y} & I_2e^{-i(\psi_x+\psi_y)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & I_{ni} \end{bmatrix}}_{T^H} \underbrace{\begin{Bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ f_5 \\ f_6 \\ f_7 \\ f_8 \\ f_9 \end{Bmatrix}}_f. \quad (6.10)$$

Ahora, multiplicamos (6.9) por T^H , donde T^H denota la transpuesta Hermítica de T ,

$$\left[\underbrace{T^H KT}_{K_R} - \omega^2 \underbrace{T^H MT}_{M_R} \right] \{u_R\} = \{f_R\}. \quad (6.11)$$

El nuevo sistema de ecuaciones tiene un tamaño $n \times n$, siendo n el número de variables independientes en u_R , y las matrices K_R y M_R son Hermíticas ya que las matrices originales K y M eran

reales y simétricas. Si despreciamos las fuerzas de cuerpo f_R obtenemos el problema de valores propio generalizado para el sistema reducido

$$[K_R]\{u_R\} = \omega^2[M_R]\{u_R\} . \tag{6.12}$$

La implementación de las condiciones de frontera de Periodicidad y Bloch periodicidad puede ser lograda de dos formas diferentes:

- modificando la conectividad, además de las funciones de forma (ver Figura 6.4); o
- ensamblando las matrices de masa y de rigidez como si no tuvieran condiciones de frontera y luego, a partir de operaciones elementales fila y operaciones elementales columna, obtener las matrices con las condiciones impuestas.

La modificación a hacer sobre la malla se ilustra bien en la Figura 6.4, en donde la continuidad está garantizada en el caso de Periodicidad y aparece un salto de fase en el caso de Bloch-periodicidad.

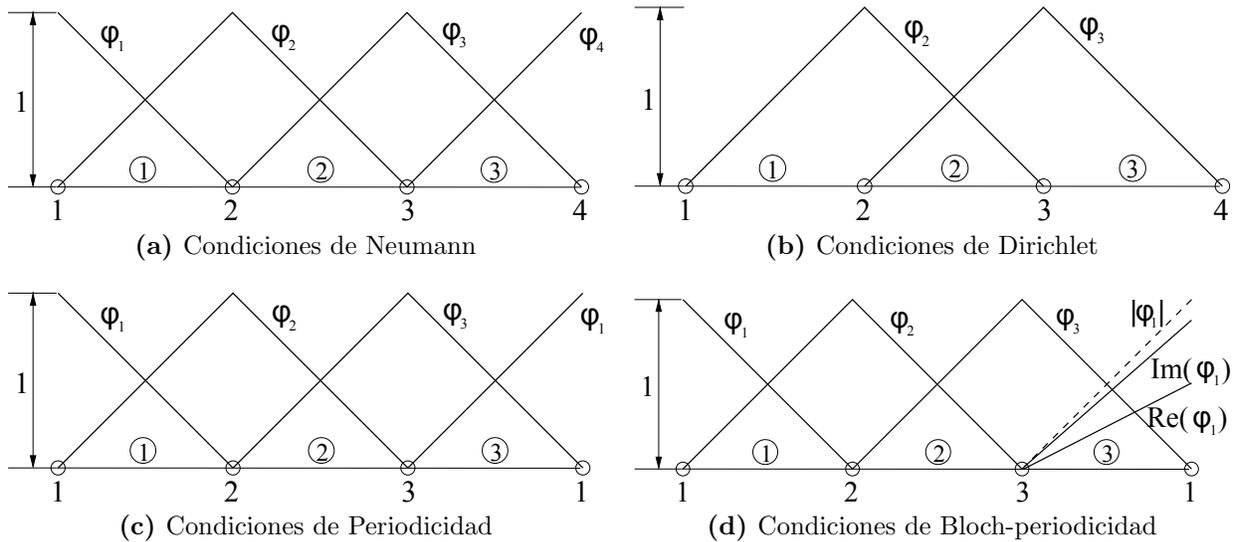


Figura 6.4. Funciones base para elementos finitos lineales. (a) Para condiciones de Neumann; (b) para condiciones de Dirichlet; (c) para condiciones de Periodicidad; and (d) para condiciones de Bloch-periodicidad. Las partes real e imaginarias de φ_1 se ilustran en la base con condiciones de Bloch en (d) para un salto de fase de $ka = \pi/3$ ($\omega = [0, a]$). El módulo de φ_1 es el mismo para $x = 0$ y para $x = a$.

En el caso de obtener las matrices sin condiciones de frontera pueden obtenerse las matrices *reducidas* de dos formas diferentes, una de ellas es la aplicación de operaciones elementales. Si

llamamos a los nodos de un lado de la celda *nodos de referencia* y a los nodos correspondientes en el lado opuesto *nodos imagen*, el procedimiento para obtener las matrices de rigidez y masa reducidas sería [103]

- Multiplicar todos los elementos A_{kl} asociados con un nodo de la frontera por $f_k^* f_l$.
- Para cada fila i de A asociada con un nodo de referencia, sumar todas las filas k asociadas con los correspondientes nodos imagen. Para cada columna j asociada con un nodo de referencia, sumar todas las columnas l correspondientes con un nodo imagen.
- Eliminar todas las filas k y las columnas k asociadas con nodos imagen.

El factor multiplicativo $f_j = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}_j}$, en donde \mathbf{x}_j son las coordenadas del nodo j -ésimo y f^* es el complejo conjugado de f . Una mejor descripción de este procedimiento se hace en el Algoritmo 1.

Otra forma de imponer las condiciones de Bloch es *ensamblando* la matriz de transformación T y haciendo los productos matriciales presentados en (6.11). Luego de aplicar este procedimiento los nodos imagen se habrán retirado del sistema de ecuaciones y estarán condensados [15, 70] en los nodos de referencia correspondientes, por tanto los identificadores de ecuaciones (numeración de ecuaciones) habrán cambiado. El procedimiento para ensamblar la matriz T es el siguiente:

- Identificar cuál será el nuevo identificador de los nodos de referencia luego de eliminar los nodos imagen.
- Para los nodos de referencia y los nodos interiores corresponde un 1 en la matriz. La fila es el identificador actual y la columna es el identificador nuevo.
- Para los nodos imagen corresponde un número complejo $e^{ik_x(x_{\text{img}}-x_{\text{ref}})}e^{ik_y(y_{\text{img}}-y_{\text{ref}})}$ en la matriz, con $x_{\text{ref}}, x_{\text{img}}, y_{\text{ref}}, y_{\text{img}}$ las coordenadas en x, y para los nodos de referencia e imagen, respectivamente. La fila es el identificador para ese nodo imagen y la columna es el identificador nuevo para el nodo de referencia que se corresponde con ese nodo imagen.
- Las entradas restantes de la matriz son iguales a cero.

Como puede verse este procedimiento es equivalente a organizar en una matriz las operaciones elementales por filas/columnas que se realizaron en el procedimiento descrito con anterioridad [105]. Este procedimiento está descrito con mayor claridad en el Algoritmo 2.

Algoritmo 1: Impone las condiciones de Bloch usando operaciones elementales fila.

Input : A: Matriz original

k_x, k_y : componentes del vector de onda

nodos: arreglo con las coordenadas de los nodos

imagen, referencia: arreglo correspondientes con los nodos imagen y de referencia

referencia2: arreglo con los nodos de referencia sin repetir

Output: Matriz A con las condiciones de Bloch impuestas

for $i=1$ **to** n_img **do** // Fases para los nodos imagen

img_index \leftarrow imagen[i]

x_img \leftarrow nodos[img_index,1]

y_img \leftarrow nodos[img_index,2]

fac $\leftarrow e^{ik_x x_img} e^{ik_y y_img}$

A[img_index, :] \leftarrow A[img_index, :]fac

A[:, img_index] \leftarrow A[:, img_index]fac*

end

for $i=1$ **to** n_ref **do** // Fases para los nodos de referencia

ref_index \leftarrow referencia2[i]

x_ref \leftarrow nodos[ref_index,1]

y_ref \leftarrow nodos[ref_index,2]

fac $\leftarrow e^{ik_x x_ref} e^{ik_y y_ref}$

A[ref_index, :] \leftarrow A[ref_index, :]fac

A[:, ref_index] \leftarrow A[:, ref_index]fac*

end

for $i=1$ **to** n_cond **do** // Suma de filas/columnas imagen a filas/columnas de referencia

img_index \leftarrow imagen[i]

ref_index \leftarrow referencia[i]

A[ref_index, :] \leftarrow A[ref_index, :] + A[img_index, :]

A[:, ref_index] \leftarrow A[:, ref_index] + A[:,img_index, :]

end

for $i=1$ **to** n_imag **do** // Eliminación de filas/columnas imagen

img_index \leftarrow imagen[i]

A[ref_index, :] \leftarrow borrar fila img_index de A

A[ref_index, :] \leftarrow borrar columna img_index de A

end

Algoritmo 2: Impone las condiciones de Bloch usando matrices de transformación.

Input : A: Matriz original

k_x, k_y : componentes del vector de onda

coords: arreglo con las coordenadas de los nodos

imagen, referencia: arreglo correspondientes con los nodos imagen y de referencia

ndof, ncond: numero de grados libertad y numero de condiciones entre nodos

Output: Matriz A con las condiciones de Bloch impuestas

index_vec $\leftarrow \vec{0}$ // Vector con los nuevos indicadores de ecuaciones

for $i=1$ **to** $ncond$ **do**

 index_vec[imagen[i]] \leftarrow - referencia[i] // Indicador igual al negativo del nodo de referencia correspondiente

end

for $i=1$ **to** $ndof$ **do** // Asignacion de los nuevos indicadores

 cont \leftarrow 0

for $j=1$ **to** $ncond$ **do** Cuenta cuantos nodos imagen hay antes del nodo actual

if $index_vec[i] < 0$ **then**

if $imagen[j] < |index_vec[i]|$ **then**

 cont \leftarrow cont + 1

end

else if $imagen[j] < i$ **then**

 cont \leftarrow cont + 1

end

end

if $index_vec[i] < 0$ **then** Asigna los nuevos indicadores

 index_vec[i] \leftarrow index_vec[i] + cont

else

 index_vec[i] \leftarrow i - cont

end

end

T \leftarrow 0; index_ref \leftarrow - index_vec

for $i=1$ **to** $ndof$ **do**

if $index_vec[i] > 0$ **then**

 j \leftarrow index_vec[i]

 T[i,j] \leftarrow 1

else

 j \leftarrow |index_vec[i]|

 i_ref \leftarrow index_ref[i]; i_img \leftarrow i

 x_img \leftarrow coords[i_img,1]; y_img \leftarrow coords[i_img,2]

 x_ref \leftarrow coords[i_ref,1]; y_ref \leftarrow coords[i_ref,2]

 fac \leftarrow $e^{i\psi_x(x_img - x_ref)} e^{i\psi_y(y_img - y_ref)}$

 T \leftarrow fac

end

end

A \leftarrow T^HAT

Capítulo 7

Resultados y Conclusiones

7.1. Material Homogéneo e Isotrópico

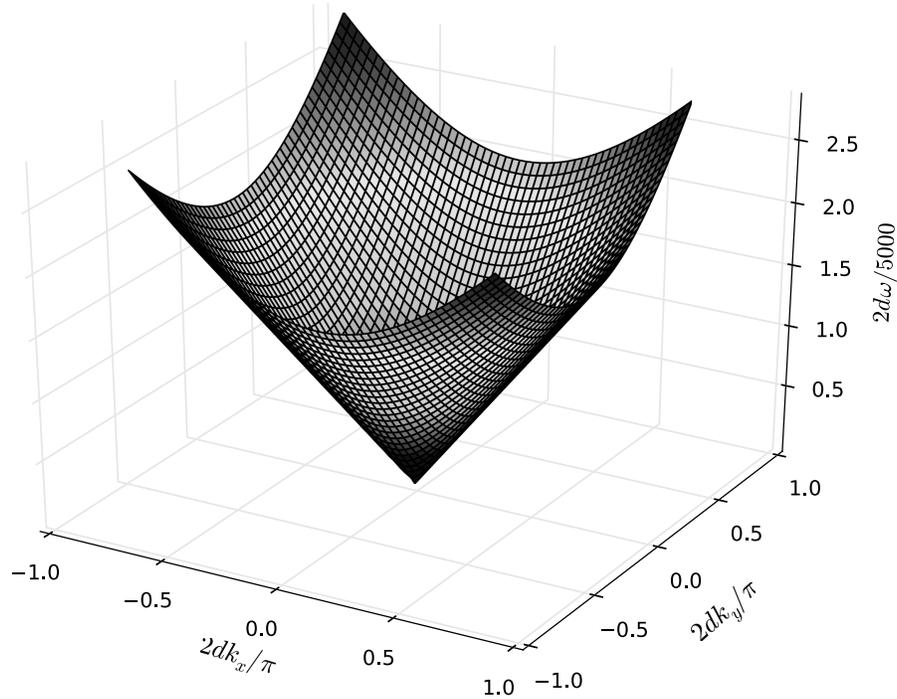
La primera verificación que se hizo del algoritmo implementado fue para un material elástico, homogéneo e isotrópico. Para este caso, se supone que el material es infinito y uniforme en las tres direcciones del espacio. Ya que se está usando la hipótesis de deformación plana el problema puede resolverse en el plano xy . La onda que viaja por el medio tiene un vector de onda \mathbf{k} , el cual tiene componentes k_x y k_y en las direcciones x e y , respectivamente. Asociado a este vector de onda existe un número de onda:

$$k = \sqrt{k_x^2 + k_y^2} . \quad (7.1)$$

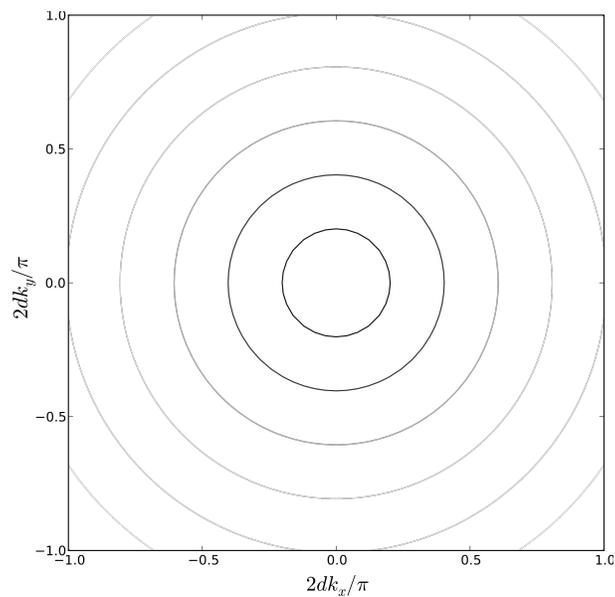
En un medio homogéneo e isotrópico no se presenta dispersión y por tanto las velocidades de fase y de grupo coinciden, lo que permite escribir la relación de dispersión como

$$\omega = ck = c\sqrt{k_x^2 + k_y^2} , \quad (7.2)$$

en donde c puede representar a α o β , las rapidezces para la onda P y S , respectivamente. La ecuación (7.2) corresponde a la parte superior de un cono en coordenadas (k_x, k_y) . La Figura 7.1 presenta este cono para valores de ω bajos, estos valores fueron calculados por FEM con el algoritmo implementado usando una celda cuadrada.



(a) Superficie



(b) Contornos de iso-frecuencia

Figura 7.1. Superficie de dispersión para valores de ω bajos.

Tomando el cero de la primera zona de Brillouin en el centro de la celda [15, 81]¹, cualquier

¹Para detalles en la terminología relacionada con la física del estado sólido se sugiere revisar el anexo dedicado

vector de onda que esté por fuera de la primera zona de Brillouin puede escribirse como

$$\mathbf{k}_{m,n} = \left[k_x + \frac{m\pi}{d_x}, k_y + \frac{n\pi}{d_y} \right]^T, \quad ,$$

siendo $2d_x$ la longitud de la celda en x , $2d_y$ la longitud de la celda en y , m un número entero que dice cuántas celdas a la derecha o a la izquierda se están considerando y n un número entero que dice cuántas celdas hacia arriba o hacia abajo se están tomando en cuenta. Esto permite reescribir los números de onda como

$$k_{m,n} = \sqrt{\left(k_x + \frac{m\pi}{d_x}\right)^2 + \left(k_y + \frac{n\pi}{d_y}\right)^2}, \quad (7.3)$$

y por tanto los valores de frecuencia angular son

$$\omega_{m,n} = c \sqrt{\left(k_x + \frac{m\pi}{d_x}\right)^2 + \left(k_y + \frac{n\pi}{d_y}\right)^2}. \quad (7.4)$$

La Figura 7.2 presenta las curvas de dispersión obtenidas con FEM para un material homogéneo. La celda considerada es un cuadrado ($2d_x = 2d_y = 2d$), y la onda incidente es en la dirección horizontal, $k_y = 0$. El número de onda se barrió en la primera zona de Brillouin, es decir, el intervalo $[0, \pi/2d]$. El material considerado fue aluminio cuyas propiedades son $E = 7,31 \times 10^{10}$ Pa, $\nu = 0,325$, $\rho = 2770$ kg/m³. La velocidades longitudinal y transversal son respectivamente $\alpha = 6198$ m/s y $\beta = 3157$ m/s.

Las soluciones para este problema pueden ser de varios tipos [15]:

- si $m = n = 0$, las curvas obtenidas son líneas rectas con una ecuación del a forma $\omega = c|k_x|$.
- si $m \neq 0$ y $n = 0$, las curvas obtenidas son rectas que se encuentran dobladas para incluirse en la primera zona de Brillouin y tienen una ecuación de la forma $\omega = c|k_y + m\pi/d|$.
- si $m = 0$ y $n \neq 0$, las curvas obtenidas son hipérbolas, resultantes de la intersección de los conos (ver Figura 7.1) $\omega_{n=0,m=0}(k_x, k_y)$ con el plano $k_y = n\pi/d$.
- si $m \neq 0$ y $n \neq 0$, las curvas obtenidas son hipérbolas que se doblaron para incluirse en la primera zona de Brillouin.

a esto.

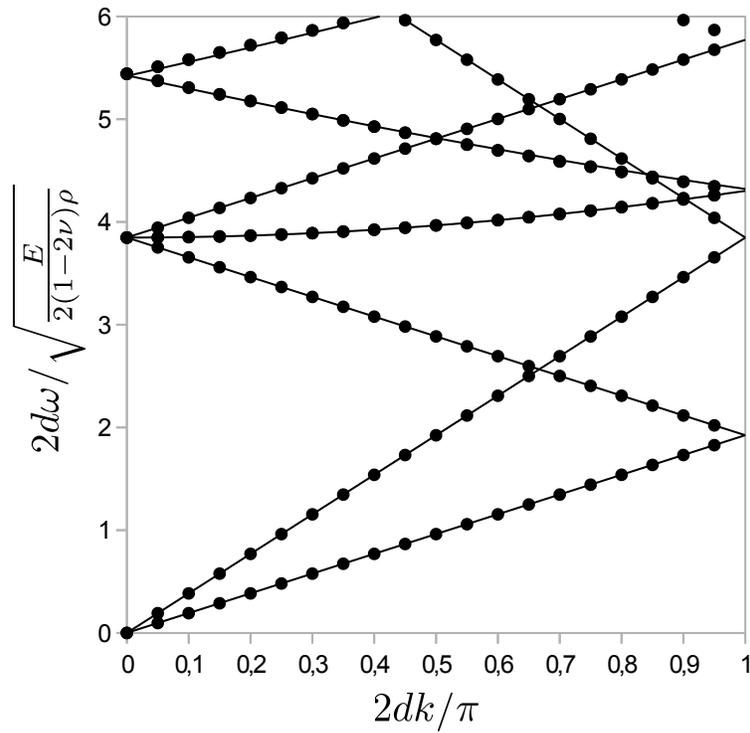


Figura 7.2. Curvas de dispersión para una celda homogénea con una onda incidiendo horizontalmente. Las líneas sólidas representan la solución analítica, los puntos representan la solución calculada con FEM.

Como prueba adicional se calcularon las curvas de dispersión para una celda hexagonal. En este caso debe tomarse en cuenta que las condiciones de Bloch-periodicidad deben ser consistentes con el tipo de celda usada. La Figura 7.3 muestra de forma gráfica la manera de considerar en este caso estas condiciones.

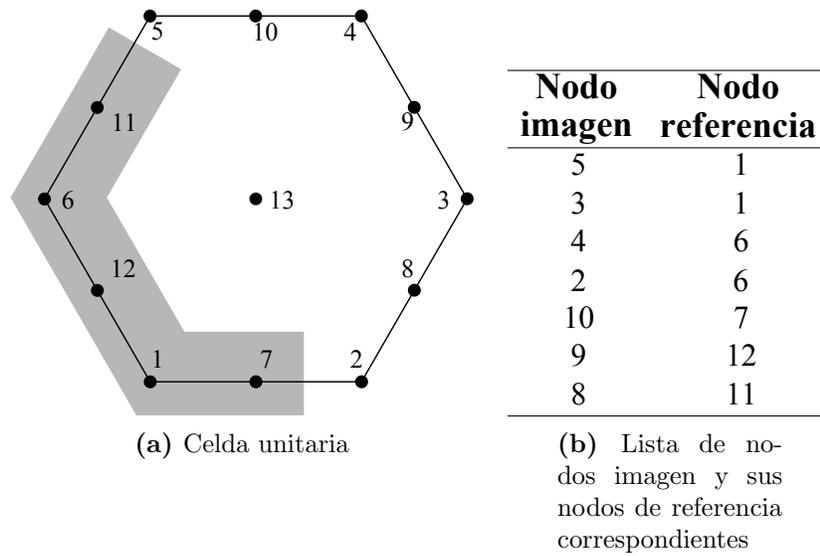


Figura 7.3. Representación gráfica de la imposición de las condiciones de Bloch-periodicidad en una celda hexagonal. Resaltados en gris se encuentran los nodos de referencia.

Los resultados, presentados en la Figura 7.4, muestran una comparación de los resultados obtenidos por FEM para una celda hexagonal y las rectas correspondientes para el caso analítico.

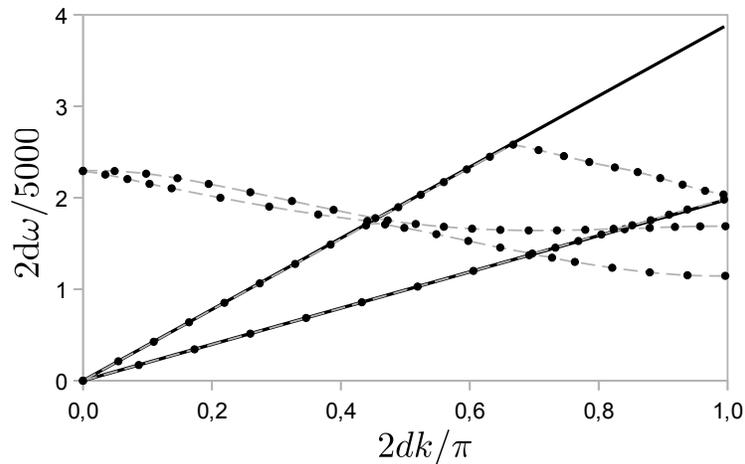


Figura 7.4. Resultados obtenidos por FEM para una celda hexagonal para un material homogéneo. Las líneas sólidas son los resultados analíticos, mientras que los puntos representan valores numéricos. Por claridad sólo se presentan los resultados analíticos para las rectas con $m = n = 0$.

El algoritmo implementado permite tener celdas con geometría arbitraria, la única condición que debe tener esta es que debe formar un teselado que llene todo el espacio [81], la Figura 7.5

muestra un ejemplo. A pesar de permitir geometrías arbitrarias para la celda es recomendable usar celdas que sean ortorrómbicas (en el caso 2D, rectángulos) ya que la imposición de las condiciones de Bloch-periodicidad se simplifica. La celda presentada en la Figura 7.5 pudo haber sido representada por un hexágono. Pero, a su vez, una red hexagonal puede ser representada por celdas rectangulares, como se presenta en la Figura 7.6.

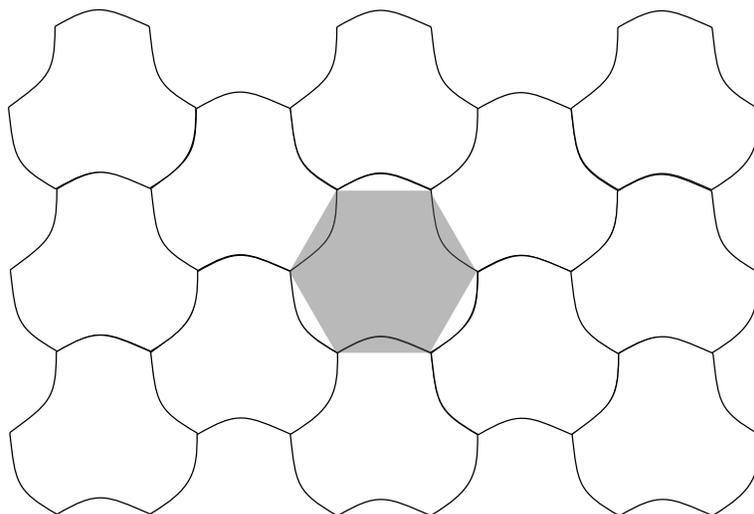


Figura 7.5. Ejemplo de teselado. Se resalta la simetría de tipo hexagonal.

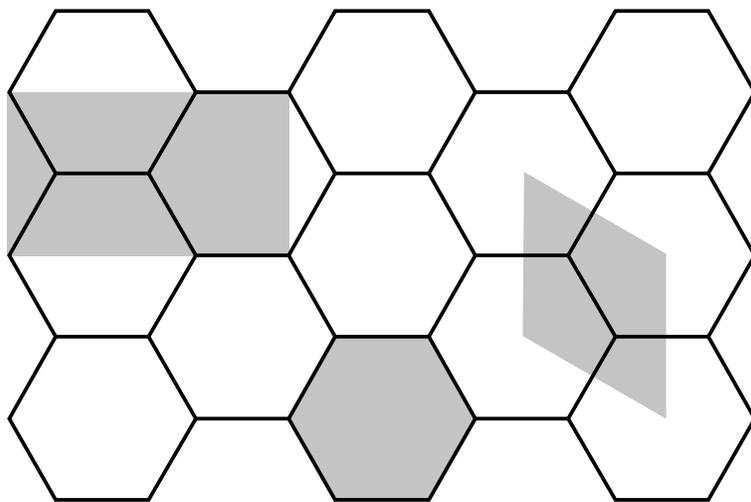


Figura 7.6. Celda rectangular para una red hexagonal. La figura presenta 3 tipos de celdas que se pueden escoger para representar una red hexagonal usando el teorema de Bloch.

7.2. Material Bicapa

Otro sistema que goza de una solución analítica es el de un material formado por capas de dos materiales distintos con una onda que viaja perpendicular la distribución de las capas (ver Figura 7.7), este problema fue estudiado por Lord Rayleigh en el caso de ondas electromagnéticas pero es matemáticamente equivalente para el caso de ondas mecánicas [106].

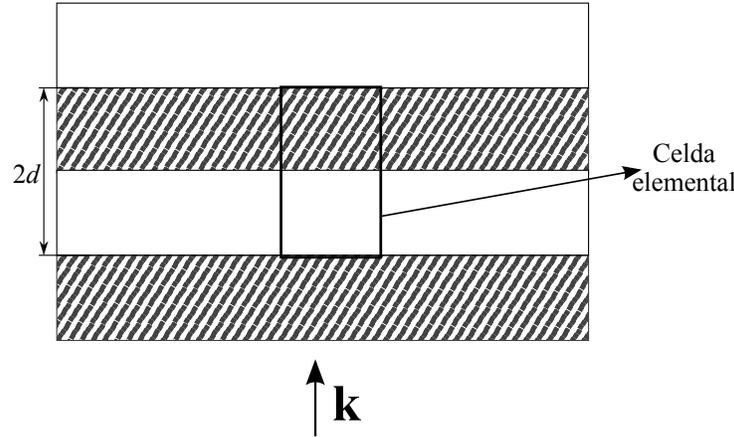


Figura 7.7. Celda para un material bicapa.

Esta solución puede ser obtenida si se expresa la solución como la superposición de dos ondas planas

$$u_i^r = A_i^r e^{jky} + B_i^r e^{-jky} ,$$

en donde r representa cada una de las capas en el material, i indica la dirección del desplazamiento, $j = \sqrt{-1}$. Como condiciones de frontera se usan la continuidad en el campo de desplazamientos y de tracciones en la interfaz además de la condición de Bloch-periodicidad. La solución resultante es

$$\cos(2dk) = \cos\left(\frac{\omega d}{c_1}\right) \cos\left(\frac{\omega d}{c_2}\right) - \frac{(\rho_1 c_1)^2 + (\rho_2 c_2)^2}{2\rho_1 \rho_2 c_1 c_2} \sin\left(\frac{\omega d}{c_1}\right) \sin\left(\frac{\omega d}{c_2}\right) , \quad (7.5)$$

siendo c_i la velocidad de la onda longitudinal/transversal y ρ_i la densidad de la capa i .

La Figura 7.8 muestra la comparación entre los resultados obtenidos por FEM y la solución analítica en el caso de un material bicapa. Los materiales usados fueron aluminio, con las mismas propiedades que en el caso homogéneo, y latón con propiedades $E = 9,2 \times 10^{10}$ Pa, $\nu = 0,33$ y $\rho = 8270$ kg/m³. La velocidades de las ondas longitudinales y transversales para el latón son $\alpha = 4060$ m/s y $\beta = 2045$ m/s, respectivamente.

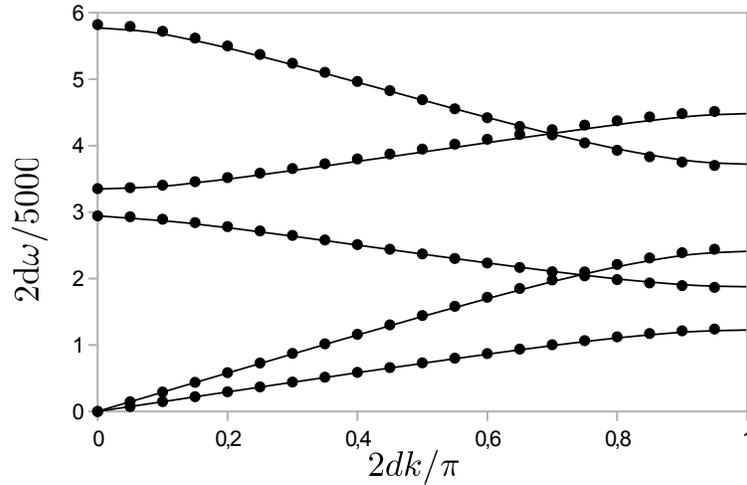


Figura 7.8. Curvas de dispersión para una celda formada por dos capas de distinto material e igual grosor para una incidencia vertical.

7.3. Celda Cuadrada con Inclusiones

Como caso de prueba se consideró una celda cuadrada con una inclusión también cuadrada. El lado de la celda es igual $2d$ mientras que el lado de la inclusión es igual a $2a$ (ver Figura 7.9), se hizo variar la razón a/d entre 0 y 1. En el caso $a/d = 0$ se tiene un material homogéneo con las propiedades de la matriz, cuando $a/d = 1$ también se tiene un material homogéneo pero con las propiedades de la inclusión.

La Figura 7.10 presenta los resultados para una celda de aluminio con una inclusión de latón para una que incide verticalmente, las propiedades son las mismas a las que se usaron en el caso del material bicapa. Estos resultados se separan en modos cuasi-longitudinales y cuasi-transversales. En un material heterogéneo, a diferencia de un material homogéneo, las componentes longitudinales y transversales de desplazamiento no están desacopladas en ondas con velocidades α y β [107]. Cabe destacar que las curvas de dispersión para diferentes valores de a/d están acotadas por los casos límite $a/d = 0$ y $a/d = 1$ que representan la propagación de ondas en aluminio y latón, respectivamente.

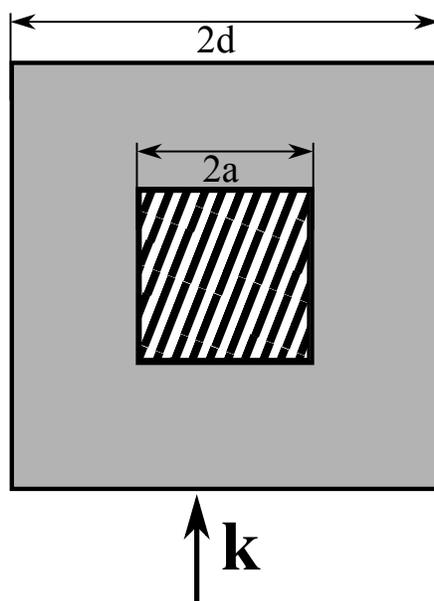


Figura 7.9. Celda para una inclusión cuadrada.

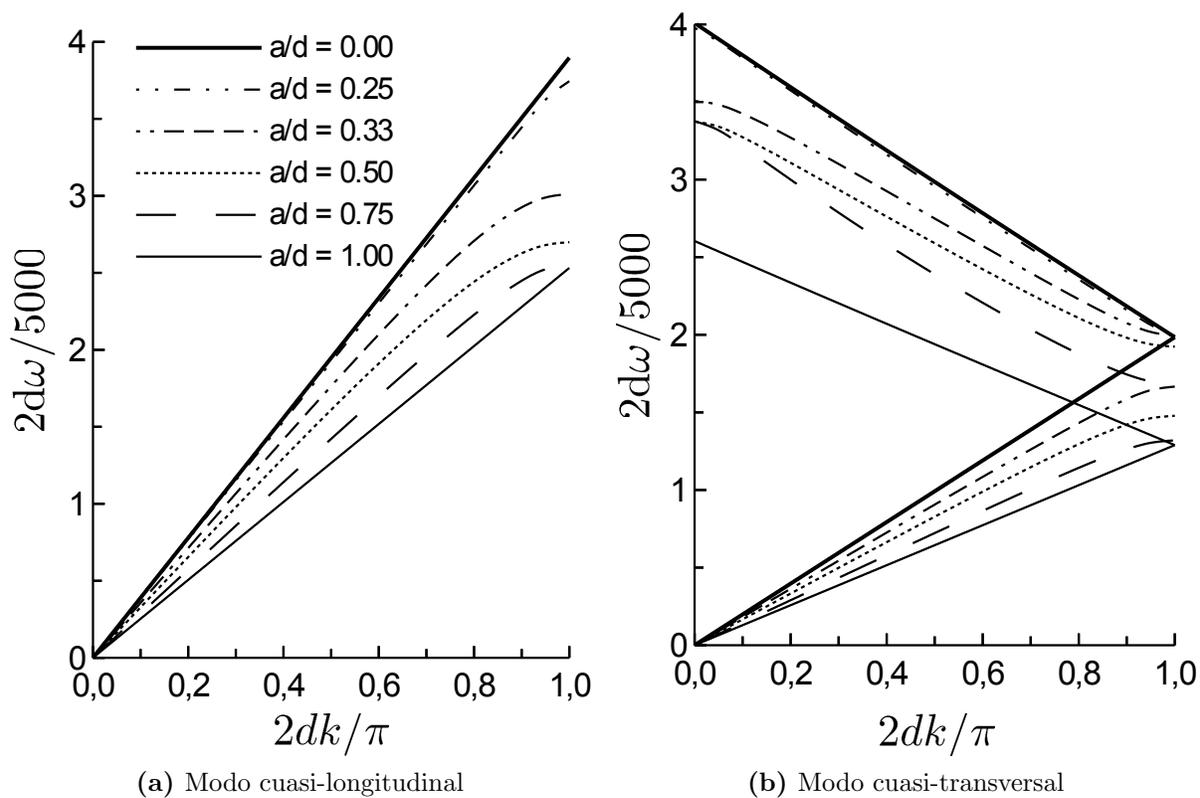


Figura 7.10. Resultados para inclusiones de diferentes tamaños.

7.4. Poro Cuadrado

Finalmente, se calcularon las relaciones de dispersión para una celda con un poro cuadrado (lugar sin ningún material). Para esto se hizo un barrido para los números de onda adimensionales $\bar{k}_x = 2dk_x/\pi \in [-1, 1]$, $\bar{k}_y = 2dk_y/\pi \in [-1, 1]$ que corresponden a barrer los números de onda dentro de la primera zona de Brillouin. La geometría de la celda se presenta en la Figura 7.11, el material considerado para la matriz fue aluminio con las mismas propiedades presentadas anteriormente.

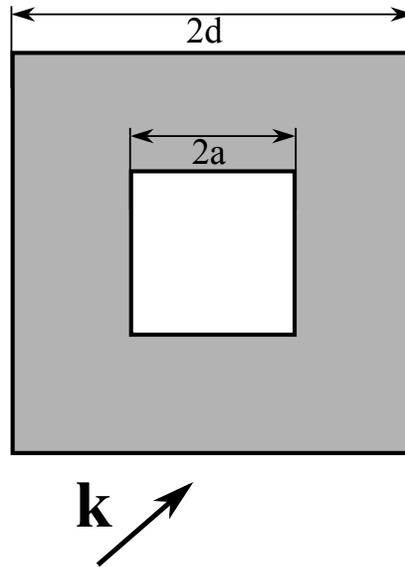
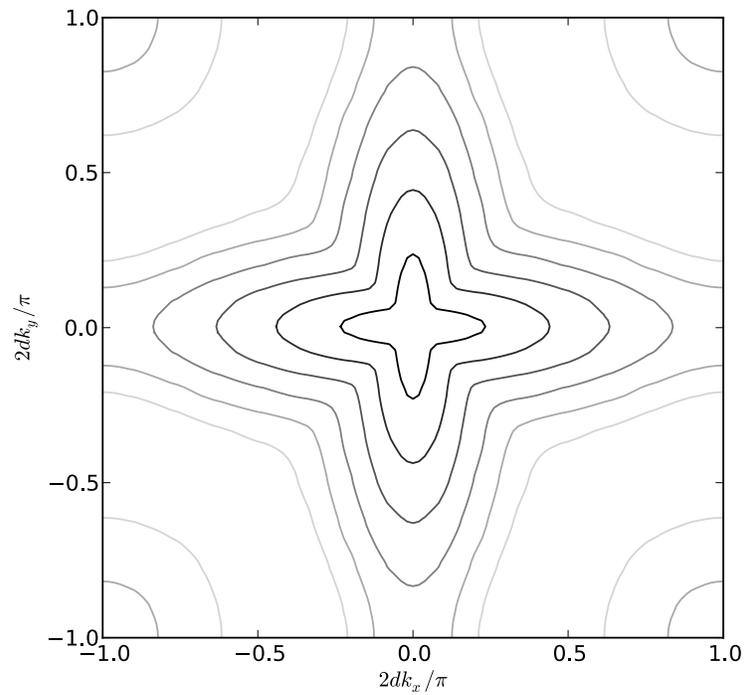
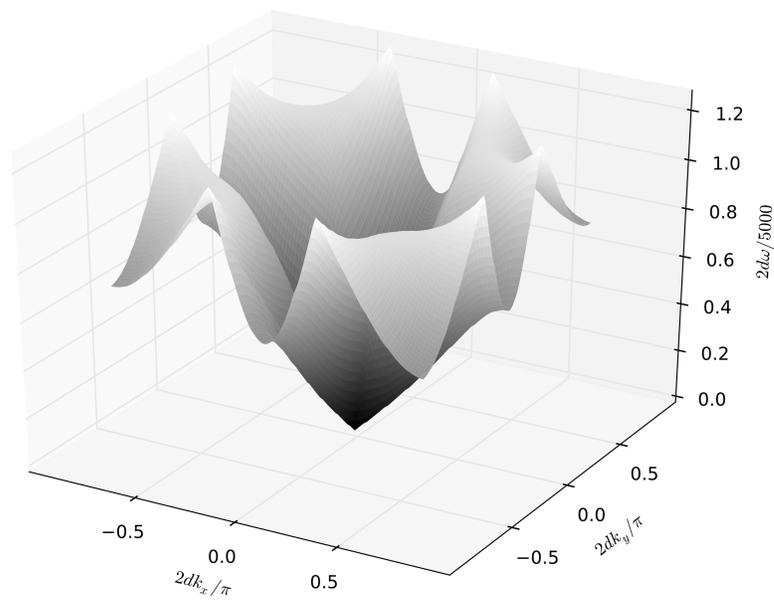


Figura 7.11. Celda con un poro cuadrado.

En este caso se usó un barrido variando el ángulo de propagación de la onda, lo que se logra variando el vector de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Este tipo de análisis permite obtener información sobre la direccionalidad que presenta un material celular con una celda específica. Las Figuras 7.12 y 7.13 se presentan las superficies de dispersión y los contornos de iso-frecuencia para los dos primeros modos que son cuasi-transversal y cuasi-longitudinal. Puede verse que el modo cuasi-longitudinal es menos direccional que el otro, lo que puede entenderse como que las ondas de este tipo ven el material con una anisotropía leve mientras que las cuasi-transversales presentan dos direcciones preferenciales de propagación que corresponden a los ejes x e y .

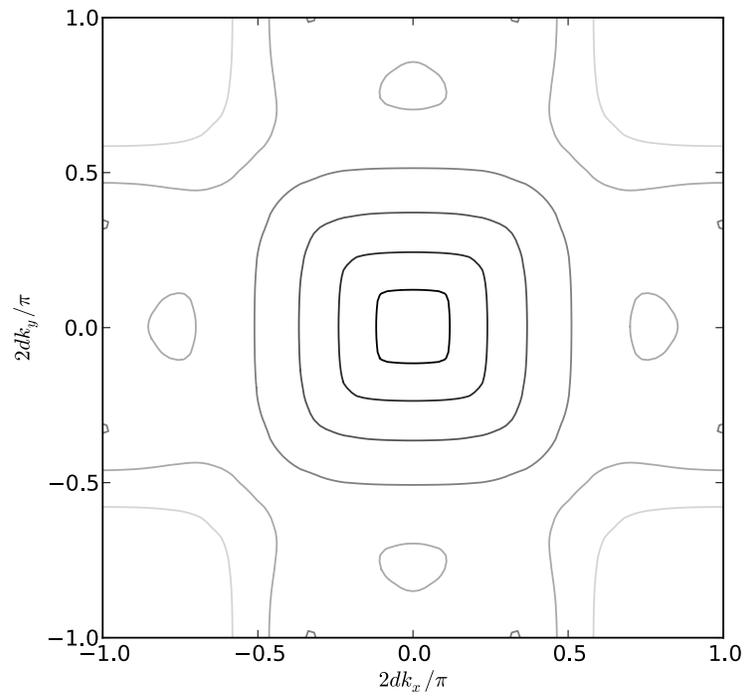


(a) Contornos de iso-frecuencia

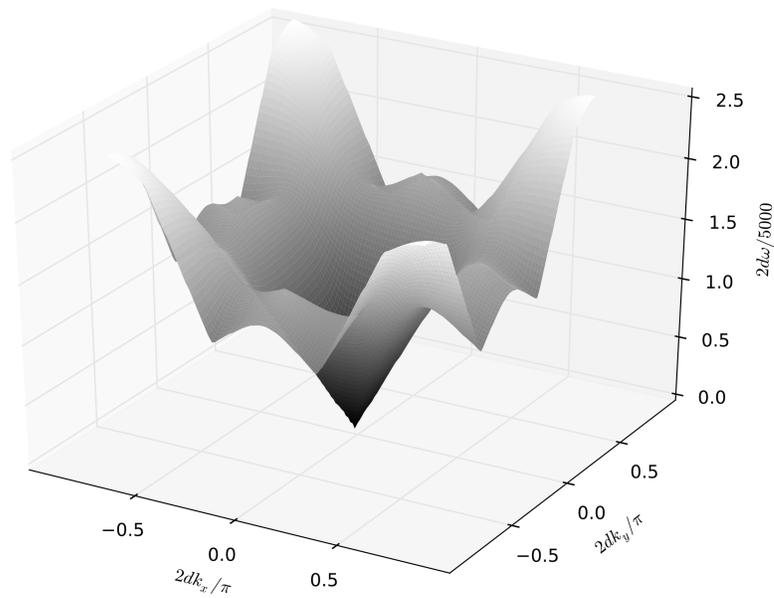


(b) Superficie de dispersión

Figura 7.12. Relación de dispersión para un modo cuasi-transversal en una celda con un poro cuadrado en su interior.



(a) Contornos de iso-frecuencia



(b) Superficie de dispersión

Figura 7.13. Relación de dispersión para un modo cuasi-longitudinal en una celda con un poro cuadrado en su interior.

7.5. Conclusiones

Se desarrolló un algoritmo que permite calcular las curvas de dispersión para un material periódico que permite ahorrar costos computacionales modelando una sola celda. Esto permite calcular la respuesta global de un material que microestructuralmente está compuesto por la celda descrita. El algoritmo que se implementó se basa en la metodología de elementos finitos para encontrar las curvas de dispersión, sin embargo la imposición de las condiciones de Bloch-periodicidad es la misma para algoritmos como el Método de las Diferencias Finitas, de Elementos de Frontera o incluso en algoritmos basados tejidos de masa-resorte [108] ya que todos estos métodos se basan en la representación de la información del sistema físico en unos puntos llamados *nodos*.

El algoritmo descrito funciona para celdas de diferente geometría desde que ésta forme un teselado como el presentado en la Figura 7.5. Se comprobó el funcionamiento del programa para geometrías rectangulares y hexagonale. A pesar de ser posible usar diferentes tipos de geometría en la celda se sugiere usar rectángulos y que esto permite simplificar la imposición de las condiciones de Bloch, para cualquier tipo de celda se puede encontrar una celda rectangular que contenga la misma informaciónl

Trabajo Futuro

Parte I

En la parte de compresión de matrices de rigidez de BEM podría ser de interés:

- Estudiar el Método de Elementos de Frontera con Multipolos Rápidos y ver si este permite un acoplamiento directo con FEM como el BEM tradicional.
- Explorar el método de Matrices Jerárquicas usando la Aproximación Adaptativa cruzada.
- Explorar métodos de compresión de matrices usando *wavelets*.

Parte II

Respecto a la propagación de ondas en materiales periódicos es de interés:

- Explorar las ventajas que presenta un Método de Elementos Finitos Espectral para estos problemas. Ya que requieren de menores discretizaciones espaciales y permiten obtener las matrices de masa bandeadas [109–111].
- Contrastar los resultados obtenidos usando este método con una simulación que incluya la microestructura del material de manera explícita e incluya muchas celdas, como presenta [82].
- Extender la metodología a modelos del continuo enriquecidos, como los sólidos de Cosserat.

Apéndice A

Funciones de Green para el Semi-espacio

A continuación se presentan las funciones de Green $G_{ij}(\mathbf{x}; \xi)$ para el campo de desplazamientos. Como ya se mencionó anteriormente $G_{ij}(\mathbf{x}; \xi)$ representa el desplazamiento del punto \mathbf{x} en la dirección i debido a una carga armónica de amplitud unitaria con frecuencia angular ω aplicada en ξ y en dirección j .

$$G_{11}(\mathbf{x}; \xi) = \frac{i}{2Lk_\beta^2\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[-\frac{k_n^2}{\nu_n} E_{\nu_n}^F - \gamma_n E_{\gamma_n}^F - \frac{k_n^2 \Gamma(k_n)}{\nu_n \Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H + \frac{4k_n^2 \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \nu_n}^H \right. \\ \left. + \frac{4k_n^2 \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H + \frac{\gamma_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right] E_{k_n} , \quad (\text{A.1})$$

$$G_{13}(\mathbf{x}; \xi) = \frac{i}{2Lk_\beta^2\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[S_{x_3} \{ -k_n E_{\nu_n}^F + k_n E_{\gamma_n}^F \} - \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H + \frac{4k_n \nu_n \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \nu_n}^H \right. \\ \left. + \frac{4k_n^3 (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H + \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right] E_{k_n} , \quad (\text{A.2})$$

$$G_{31}(\mathbf{x}; \xi) = \frac{i}{2Lk_\beta^2\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[S_{x_3} \{ -k_n E_{\nu_n}^F + k_n E_{\gamma_n}^F \} - \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H + \frac{4k_n^3 (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \nu_n}^H \right. \\ \left. + \frac{4k_n \nu_n \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H - \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right] E_{k_n} , \quad (\text{A.3})$$

$$G_{33}(\mathbf{x}; \xi) = \frac{i}{2Lk_\beta^2\mu} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[-\nu_n E_{\nu_n}^F - \frac{k_n^2}{\gamma_n} E_{\gamma_n}^F + \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H + \frac{4k_n^2 \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \nu_n}^H \right. \\ \left. + \frac{4k_n^2 \nu_n \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H - \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right] E_{k_n} . \quad (\text{A.4})$$

En estas ecuaciones se usan las siguientes abreviaciones

$$\begin{aligned} k_\alpha &= \frac{\omega}{\alpha}, \\ k_\beta &= \frac{\omega}{\beta}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

donde α y β son las velocidades de las ondas de compresión y de corte, respectivamente, que se calculan de acuerdo con

$$\begin{aligned} \alpha^2 &= \frac{\lambda + 2\mu}{\rho}, \\ \beta^2 &= \frac{\mu}{\rho}, \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

donde ρ es la densidad del medio, y λ y μ son las constantes de Lamé. Estas constantes pueden escribirse en función del módulo de elasticidad E y el coeficiente de Poisson ν como

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{E\nu}{(1+\nu)(1-2\nu)}, \\ \mu &= \frac{E}{2(1+\nu)}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

También se considera que

$$\begin{aligned} \nu_n &= (k_\alpha^2 - k_n^2)^{1/2} & \Im(\nu_n) < 0, \\ \gamma_n &= (k_\beta^2 - k_n^2)^{1/2} & \Im(\gamma_n) < 0, \\ k_n &= \frac{2\pi}{L}n. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

En esta última expresión L representa la longitud en la dirección horizontal x_1 en las que se presentan cargas estacionarias espurias producidas por la expansión en números discretos de onda. Esta longitud se toma tal que el tiempo que tarda una onda longitudinal en atravesar esta distancia menos el tiempo que tarda esa misma onda en atravesar la dimensión más grande de la zona de interés del problema, y es mayor que el tiempo de la ventana de observación de la respuesta.

Continuando con la notación usada

$$\begin{aligned} S_{x_3} &= \text{sgn}(x_3 - \xi_3), \\ E_{k_n} &= e^{-ik_n(x_1 - \xi_1)}, \\ E_{\nu_n}^F &= e^{-i\nu_n|x_3 - \xi_3|}, \\ E_{\gamma_n}^F &= e^{-i\gamma_n|x_3 - \xi_3|}. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \Delta(k_n) &= +2(k_n^2 - k_\beta^2)^2 + 4k_n^2\nu_n\gamma_n, \\ \Gamma(k_n) &= -2(k_n^2 - k_\beta^2)^2 + 4k_n^2\nu_n\gamma_n. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned}
 E_{\nu_n \nu_n}^H &= e^{-i\nu_n(x_3 + \xi_3)}, \\
 E_{\gamma_n \nu_n}^H &= e^{-i(\gamma_n x_3 + \nu_n \xi_3)}, \\
 E_{\nu_n \gamma_n}^H &= e^{-i(\nu_n x_3 + \gamma_n \xi_3)}, \\
 E_{\gamma_n \gamma_n}^H &= e^{-i\gamma_n(x_3 - \xi_3)}.
 \end{aligned} \tag{A.11}$$

En todas estas ecuaciones la coordenada x_1 está orientada horizontalmente y la coordenada x_3 está orientada en dirección vertical y apuntando hacia el semi-espacio, formando sistema de mano dextrógiro.

A partir de las relaciones constitutivas para un material elástico lineal bajo la hipótesis de deformación plana se pueden calcular las tracciones en cualquier punto del semi-espacio que estén asociadas al plano con vector normal \mathbf{n} . A continuación se presentan las funciones de Green para tracciones $H_{ij}(\mathbf{x}, \mathbf{n}; \xi)$. $H_{ij}(\mathbf{x}; \xi, \mathbf{n})$ representa la tracción en dirección i asociada al plano con vector normal \mathbf{n} en el punto \mathbf{x} debida a una carga armónica de amplitud unitaria con frecuencia angular ω aplicada en ξ en la dirección j .

$$\begin{aligned}
 H_{11}(\mathbf{x}, \mathbf{n}; \xi) &= \frac{-1}{2Lk_\alpha^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left\{ \frac{k_n}{\nu_n} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n}^F + k_n \gamma_n (1 - R) E_\gamma^F + \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\nu_n \Delta(k_n)} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \right. \\
 &+ \frac{4k_n^3 \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (R - 1) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{4k_n \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 &+ \left. \frac{k_n \gamma_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (R - 1) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_1 \\
 &+ \left\{ (2S_{x_3} k_n^2) E_{\nu_n}^F + S_{x_3} (\gamma_n^2 - k_n^2) E_{\gamma_n}^F + \frac{2k_n^2 \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \\
 &+ \frac{4k_n^2 (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 - \gamma_n^2) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{8k_n^2 \gamma_n \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 &+ \left. \frac{\Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 - \gamma_n^2) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_3 \frac{k_\alpha^2}{k_\beta^2} \Big] E_{k_n} \quad ,
 \end{aligned} \tag{A.12}$$

$$\begin{aligned}
 H_{31}(\mathbf{x}, \mathbf{n}; \xi) = & \frac{-1}{2Lk_\alpha^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left\{ \frac{k_n}{\nu_n} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n}^F + k_n \gamma_n (R-1) E_{\gamma_n}^F + \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\nu_n \Delta(k_n)} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \right. \\
 & + \frac{4k_n^3 \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (1-R) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{4k_n \gamma_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 & \left. \left. + \frac{k_n \gamma_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (1-R) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_3 \right. \\
 & + \left\{ (2S_{x_3} k_n^2) E_{\nu_n}^F + S_{x_3} (\gamma_n^2 - k_n^2) E_{\gamma_n}^F + \frac{2k_n^2 \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \\
 & + \frac{4k_n^2 (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 - \gamma_n^2) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{8k_n^2 \gamma_n \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 & \left. \left. + \frac{\Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 - \gamma_n^2) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_1 \frac{k_\alpha^2}{k_\beta^2} \right] E_{k_n} \ ,
 \end{aligned} \tag{A.13}$$

$$\begin{aligned}
 H_{13}(\mathbf{x}, \mathbf{n}; \xi) = & \frac{-1}{2Lk_\alpha^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left\{ 2k_n \gamma_n E_{\nu_n}^F + \frac{k_n}{\nu_n} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n}^F - \frac{2k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \right. \\
 & + \frac{4k_n \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (\gamma_n^2 - k_n^2) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{8k_n^3 \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 & \left. \left. + \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\gamma_n \Delta(k_n)} (k_n^2 - \gamma_n^2) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_3 \frac{k_\alpha^2}{k_\beta^2} \right. \\
 & + \left\{ S_{x_3} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n}^F + S_{x_3} k_n^2 (R-1) E_{\gamma_n}^F - \frac{\Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \\
 & + \frac{4k_n^2 \gamma_n \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (1-R) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{4k_n^2 (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 & \left. \left. + \frac{k_n^2 \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (R-1) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_1 \right] E_{k_n} \ ,
 \end{aligned} \tag{A.14}$$

$$\begin{aligned}
 H_{33}(\mathbf{x}, \mathbf{n}; \xi) = & \frac{-1}{2Lk_\alpha^2} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\left\{ 2k_n \gamma_n E_{\nu_n}^F + \frac{k_n}{\nu_n} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n}^F - \frac{2k_n \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \right. \\
 & + \frac{4k_n \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (\gamma_n^2 - k_n^2) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{8k_n^3 \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 & \left. \left. + \frac{k_n \Gamma(k_n)}{\gamma_n \Delta(k_n)} (k_n^2 - \gamma_n^2) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_1 \frac{k_\alpha^2}{k_\beta^2} \right. \\
 & + \left\{ S_{x_3} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n}^F + S_{x_3} k_n^2 (1 - R) E_{\gamma_n}^F - \frac{\Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 + \nu_n^2 R) E_{\nu_n \nu_n}^H \right. \\
 & + \frac{4k_n^2 \gamma_n \nu_n (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (R - 1) E_{\gamma_n \nu_n}^H - \frac{4k_n^2 (2k_n^2 - k_\beta^2)}{\Delta(k_n)} (k_n^2 R + \nu_n^2) E_{\nu_n \gamma_n}^H \\
 & \left. \left. + \frac{k_n^2 \Gamma(k_n)}{\Delta(k_n)} (1 - R) E_{\gamma_n \gamma_n}^H \right\} n_3 \right] E_{k_n} , \tag{A.15}
 \end{aligned}$$

donde

$$R = 1 - 2 \frac{k_\alpha^2}{k_\beta^2} .$$

Se puede verificar que las funciones de Green para las tracciones satisfacen las condiciones de frontera en el plano, es decir, las condiciones de superficie libre. Si se evalúa $x_3 = 0$ y $n_1 = 0$ el resultado es cero.

Apéndice B

Conceptos sobre Física del Estado Sólido

Este anexo corresponde al Capítulo 3 de la referencia [98], con unas leves modificaciones. Se incluye como anexo con el permiso de reproducción de Yhefferson Gutiérrez, su autor.

B.1. Cristales

En la física del estado sólido se le llama cristal a un sólido homogéneo cuya estructura interna presenta un patrón ordenado en sus componentes reticulares, sean átomos, iones o moléculas. A diferencia de los sólidos amorfos, los cristales tienen una geometría regular y un grado de anisotropía en sus propiedades que depende de su estructura, además de tener la característica de poseer elementos de simetría. Sin embargo, la concepción de un cristal podría ir más allá de aquellos estudiados por el estado sólido y la química, en la cual consideramos un cristal como un ente matemático que cumple las características descritas previamente y en el que sus componentes reticulares son simplemente puntos interpretados como nodos.

B.2. Red Puntual

Con el fin de describir las estructuras cristalinas debemos introducir el concepto de red puntual, un ente matemático sobre el cual se puede definir y construir una red cristalina. Ésta consiste en un arreglo infinito de puntos discretos que llenan todo el espacio, en el cual se define una base vectorial que genera la red a través de un conjunto de operaciones de traslación discretas sobre la base definida, formando las llamadas redes de Bravais, dicha base está compuesta por un conjunto de vectores llamados **vectores primitivos** que definen la estructura o forma de la red, de manera

que podemos definir una red respecto a su base \mathbf{a} , la cual tiene la forma:

$$\mathbf{a} = \left\{ \sum_{i=1}^n A_i \hat{\mathbf{a}}_i \right\}, \quad (\text{B.1})$$

donde $\{\hat{\mathbf{a}}_1, \dots, \hat{\mathbf{a}}_n\}$ es una base de R^n con A_i entero. En general una red se expresa en términos de un vector \mathbf{R} llamado vector de red, el cual reúne todas las características de la red: su base \mathbf{a} y sus propiedades de simetría al aplicar operaciones de traslación sobre dicha base, de tal forma que:

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^n l \mathbf{a}_i,$$

donde los coeficientes l son números enteros que indican la cantidad de desplazamientos aplicados sobre la base de la red, generando así, de forma parcial o total la red definida por \mathbf{a} . El entero contenido en los coeficientes l no necesariamente es el mismo para cada componente y en el caso particular en el que todos los coeficientes l son iguales a la unidad, el vector de red \mathbf{R} es el mismo vector base o primitivo \mathbf{a} , y describe la mínima región de la red a partir de la cual se puede generar dicha red en su totalidad, esta región se conoce como **celda unitaria o primitiva**.

B.3. Características de la Red

Para facilitar el estudio de una red, definida por un vector \mathbf{R} , elegimos una región del espacio sobre la cual aplicando operaciones de traslación podamos generar toda la red, dicha zona es llamada la **celda unitaria** de la red y se caracteriza por poseer un solo elemento reticular o nodo; en general su construcción puede abarcar un amplio número de posibilidades, pero las más importantes son: la que se define a partir de los vectores primitivos trazando paralelas recíprocas desde sus extremos hasta el punto en el que se cruzan como se muestra en la Figura B.1, y la que se forma a partir de la celda de Wigner-Seitz [112] como veremos más adelante.

Otra característica a tener en cuenta es el **parámetro de red**, dado por la longitud de la celda unitaria, y con base en el cual se aplican las operaciones de simetría. Puede haber mas de un parámetro diferente según el tipo de red que se esté estudiando. Los vectores de red primitivos se definen respecto al parámetro de red, el cual queda incluido en los coeficientes A_i de (B.1).

B.4. Funciones Periódicas en el Espacio de Frecuencias

Una función $f(\mathbf{r})$ es periódica si cumple la condición de periodicidad dada por:

$$f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} + \mathbf{R}), \quad (\text{B.2})$$

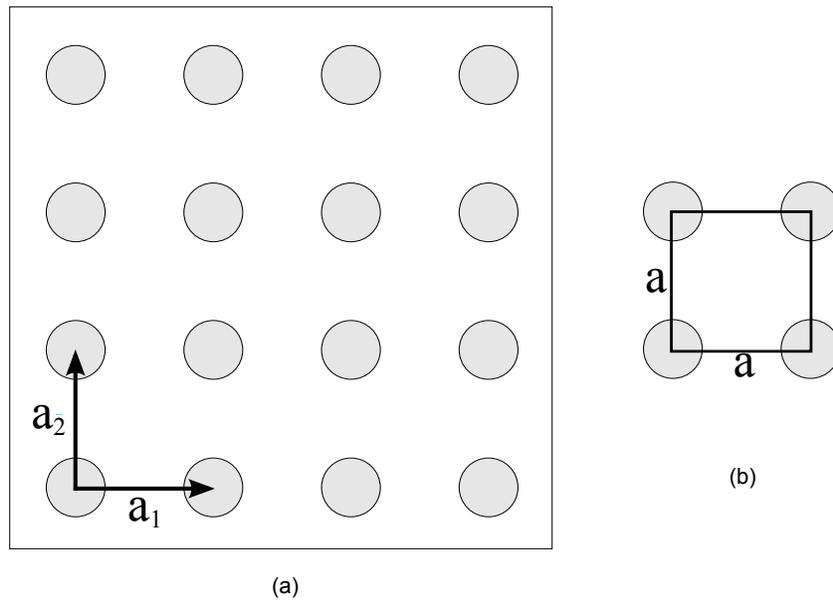


Figura B.1. Esquema de una red puntual bidimensional: (a) sección de una red cuadrada con vectores primitivos \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 , (b) su correspondiente celda unitaria con parámetros de red iguales a a .

en cuyo caso decimos que \mathbf{R} es el periodo de la función. Se observa que si \mathbf{R} es el vector primitivo de una red, entonces se puede concluir que una red es una función periódica, ya que si modelamos la función que describe su celda unitaria, dicha función se mantendría invariante bajo **operaciones de traslación discreta**, de manera que al aplicar estas traslaciones sobre la celda unitaria generamos la red en su totalidad llenando todo el espacio sobre la que esta definida. Más adelante veremos con mas detalle en que consisten estas operaciones.

Con esto en mente consideremos una función periódica $f(\mathbf{r})$ asociada a una celda unitaria, para esa función se tiene que (B.2) debe cumplirse para todos los vectores de red \mathbf{R} que trasladan la red al interior de si misma, es decir, que trasladan la celda unitaria sobre todo el espacio en el que está definida dicha red; veamos lo que sucede cuando analizamos nuestra función en el espacio de frecuencias también conocido como espacio recíproco o de Fourier debido a que podemos ir del espacio directo al recíproco y del recíproco al directo por medio de la transformada y transformada inversa de Fourier respectivamente. En ese orden de ideas, para expresar nuestra función $f(\mathbf{r})$ en términos de su transformada en el espacio de las frecuencias debemos utilizar la transformada de Fourier, la cual nos permite construir una función a partir de integrar ondas planas sobre todas las frecuencias y es por definición [113]:

$$f(\mathbf{r}) = \int_v g(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{k},$$

donde $g(\mathbf{k})$ representa la función en el espacio recíproco y dice qué tanto aporta a $f(\mathbf{r})$ una onda plana con vector de onda \mathbf{k} ; ahora, debido a la condición de periodicidad (B.2):

$$\begin{aligned}\int_v g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{k} &= \int_v g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})}d^3\mathbf{k}, \\ \int_v g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{k} &= \int_v g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}d^3\mathbf{k}.\end{aligned}$$

La periodicidad de $f(\mathbf{r})$ nos indica que para su transformada de Fourier $g(\mathbf{k})$ se debe cumplir que:

$$g(\mathbf{k}) = g(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}. \quad (\text{B.3})$$

Esto sólo es posible si $g(\mathbf{k}) = 0$ o $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$; la primera condición es la solución trivial y no tiene sentido en nuestro sistema, de manera que se debe cumplir $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$, lo cual quiere decir que $g(\mathbf{k})$ es cero en todas partes a excepción de picos en los valores de \mathbf{k} en los cuales $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$ para cualquier \mathbf{R} . De lo anterior concluimos que para construir una función periódica de red $f(\mathbf{r})$ a partir de ondas planas, sólo necesitamos considerar aquellas ondas planas con vectores de onda \mathbf{k} tales que $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} = 1$, o de forma equivalente, $\mathbf{k}\cdot\mathbf{R} = 2\pi n$ con n entero. Estos vectores se denominan los vectores de red recíproca y los denotamos con la letra \mathbf{G} . Ahora podemos expresar nuestra función $f(\mathbf{r})$ como una sumatoria ponderada sobre todos los vectores de red recíproca, de manera que:

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} f(\mathbf{G})e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}.$$

B.5. Red Recíproca

Ya vimos cómo una red puntual en el espacio directo y sobre la cual se construyen las redes cristalinas, puede expresarse en términos de una función $f(\mathbf{r})$ que describe su celda unitaria y vimos también cómo dicha función puede expresarse en términos de una sumatoria que contiene los vectores \mathbf{G} y que es el resultado de aplicar un análisis de Fourier sobre la función $f(\mathbf{r})$, así como de sus propiedades de simetría debido a su periodicidad. Estos vectores \mathbf{G} se relacionan directamente con los vectores de la red espacial \mathbf{R} de modo que $\mathbf{G}\cdot\mathbf{R} = 2\pi n$ con n entero. Observemos que dada esta igualdad, \mathbf{G} está relacionado con la periodicidad de la red espacial contenida en \mathbf{R} , de manera que pueden definir una red propia en el espacio de frecuencias cuya periodicidad se relaciona directamente con la periodicidad de la red definida por \mathbf{R} en el espacio directo; es así como podemos decir que la red definida por \mathbf{G} es la red recíproca de aquella definida por \mathbf{R} .

En general, según el espacio en el que se esté trabajando el término red recíproca hace referencia a la red correspondiente en el otro espacio, bien sea el espacial o directo, o el de frecuencias, ya que ambos espacios son recíprocos uno del otro. Sin embargo, en nuestro estudio concentraremos el concepto de red recíproca a la red en el espacio de frecuencias, es decir aquella definida por los vectores \mathbf{G} , los cuales llamamos vectores de la red recíproca. Como ya se ha visto, los vectores de

red \mathbf{R} pueden escribirse en términos de los vectores primitivos \mathbf{a} que a su vez pueden ser escritos en términos de los vectores unitarios \hat{a}_i y el parámetro de red a , de tal forma que para una red cúbica en las tres dimensiones se tiene:

$$\mathbf{R} = \sum_{i=1}^n l\mathbf{a}_i = la\hat{a}_1 + na\hat{a}_2 + ma\hat{a}_3. \quad (\text{B.4})$$

De forma análoga, los vectores de la red recíproca \mathbf{G} pueden escribirse en términos de los vectores primitivos de la red recíproca \mathbf{b} con vectores unitarios \hat{b}_i y parámetro de red b , de manera que:

$$\mathbf{b} = \left\{ \sum_{i=1}^n B_i \hat{b}_i \right\}, \quad (\text{B.5})$$

donde $\{\hat{b}_1, \dots, \hat{b}_n\}$ es una base del espacio de frecuencias rectangular K^n con B_i entero. Además:

$$\mathbf{G} = \sum_{i=1}^n L\mathbf{b}_i = Lb\hat{b}_1 + Nb\hat{b}_2 + Mb\hat{b}_3, \quad (\text{B.6})$$

donde los coeficientes L son números enteros no necesariamente iguales para cada componente y dan cuenta de la cantidad de desplazamientos aplicados sobre la base \hat{b}_i , de manera que se pueda generar de forma parcial o total la red recíproca. Conociendo la forma de \mathbf{R} y \mathbf{G} , y debido al requerimiento:

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n, \quad (\text{B.7})$$

se tiene que:

$$\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = (l\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2 + m\mathbf{a}_3) \cdot (L\mathbf{b}_1 + N\mathbf{b}_2 + M\mathbf{b}_3) = 2\pi n', \quad (\text{B.8})$$

Para cualquier elección entera de (l, n, m, L, N, M) este requerimiento se debe satisfacer para un determinado n' . Con esto en mente y dada la ortonormalidad de los vectores base \hat{a}_i y \hat{b}_i , de forma intuitiva podríamos pensar en construir los vectores \mathbf{b}_i de manera que $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi$ si $i = j$ y $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 0$ si $i \neq j$, es decir:

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}. \quad (\text{B.9})$$

Ahora, para encontrar tales vectores \mathbf{b}_j dado un sistema determinado de vectores \mathbf{a}_i , tenemos en cuenta la identidad vectorial $\mathbf{v} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{w}) = 0$ para cualquier par de vectores \mathbf{v} y \mathbf{w} en el mismo espacio; de esta manera podemos construir los vectores \mathbf{b}_i como sigue:

$$1 = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)},$$

como ya es sabido $\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 = 2\pi$, entonces:

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)},$$

$$\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{b}_1 = \frac{\mathbf{a}_1 \cdot 2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)},$$

comparando términos se puede ver que:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.$$

Mediante un procedimiento análogo construimos \mathbf{b}_2 y \mathbf{b}_3 de manera que:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi(\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2)}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.$$

B.6. Primera Zona de Brillouin

Cuando analizamos una función periódica y tomamos su transformada de Fourier, encontramos que, dada la condición de periodicidad (B.2) para su transformada $g(\mathbf{k})$, se debe cumplir (B.3) lo que impone el requerimiento (B.7) con n entero. Ahora consideremos una función definida sobre una red de la forma $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$. De la condición de periodicidad tenemos que:

$$e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})}, \quad (\text{B.10})$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (\text{B.11})$$

Observemos que para un determinado vector \mathbf{k} la función es la misma salvo un multiplicador global que sólo aporta información de amplitud y como veremos mas adelante, dicha información no es relevante para nuestro estudio. Por lo tanto decimos que ambos lados de la igualdad representan la misma función. Ahora aumentemos el vector de onda \mathbf{k} en una cantidad entera de veces \mathbf{G} , de tal manera que ahora $\mathbf{k} = \mathbf{k} + m\mathbf{G}$ con m entero. Entonces:

$$\begin{aligned} e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}} &= e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R})}, \\ &= e^{im\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{k}+m\mathbf{G})\cdot\mathbf{r}}, \end{aligned}$$

ya que $\mathbf{G} \cdot \mathbf{R} = 2\pi n$. Cuando aumentamos el vector de onda \mathbf{k} un número entero de veces \mathbf{G} se puede ver que para un determinado $\mathbf{k} + m\mathbf{G}$, al aplicar la condición de periodicidad (B.2) que se manifiesta como una operación de traslación bajo la cual la función permanece invariante; se obtiene infinito número de funciones con el mismo factor multiplicativo y la misma fase, debido a que el aumento de \mathbf{k} en una cantidad $m\mathbf{G}$ significa una traslación de $2\pi n$ en el espacio recíproco y como consecuencia de esto se puede observar una grado de redundancia en el vector de onda \mathbf{k} , de manera que solo es necesario considerar aquellos valores de \mathbf{k} contenidos en un intervalo de 2π en todas las direcciones cuando la red es cubica, y en general para cualquier tipo de red, aquella región de la red recíproca cuyos \mathbf{k} no se pueden obtener por la adición de vectores $m\mathbf{G}$ sobre algún otro \mathbf{k} en dicha región, particularmente aquí \mathbf{G} es el vector de la red recíproca primitivo.

Esta región se define alrededor de un punto o nodo de la red recíproca, en el cual se establece el origen $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ y es conocida como la primera zona de Brillouin. A partir de este origen también se

definen segundas, terceras y en general enésimas zonas de Brillouin según el número entero de veces m que se puede adicionar el vector de red recíproca \mathbf{G} sin generar una redundancia particular, de manera que esta región será la $|m|+1$ -ésima zona de Brillouin. Las zonas de Brillouin se construyen como celdas de Wigner-Seitz. En particular, para la primera zona como se muestra en la Figura B.2, esto es: se trazan los vectores de la red recíproca \mathbf{G} desde el punto de red establecido como origen a los primeros vecinos y se trazan planos perpendiculares a dichos vectores en sus puntos medios, la intersección de estos planos define la celda de Wigner-Seitz para la primera zona de Brillouin.

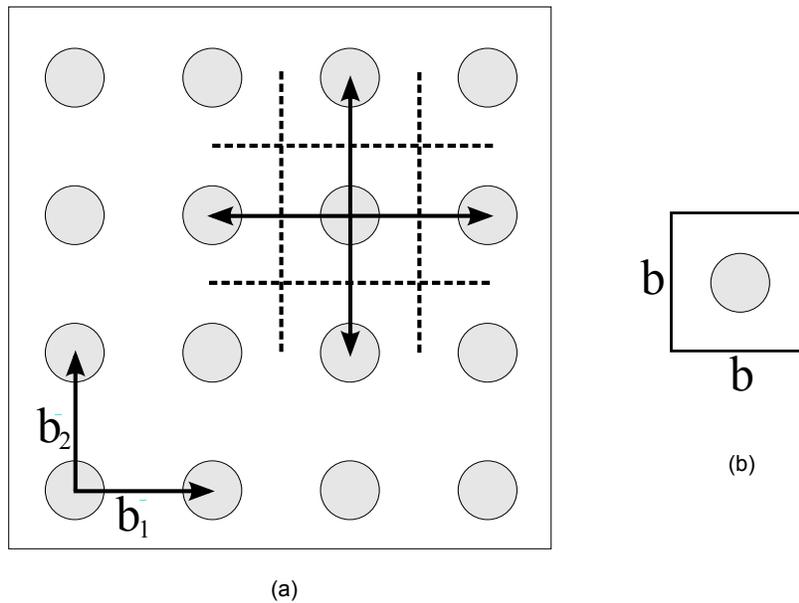


Figura B.2. Esquema de una red puntual bidimensional en el espacio de frecuencias: (a) sección de una red cuadrada con vectores primitivos \mathbf{b}_1 y \mathbf{b}_2 y construcción de una celda de Wigner-Seitz, (b) su correspondiente celda unitaria o primera zona de Brillouin.

B.7. Condición de Difracción

Como se introdujo anteriormente, un cristal es una estructura macroscópica que posee una función que es periódica en el espacio. En el caso de ondas mecánicas, la densidad de masa ρ , el módulo de Young E y el coeficiente de Poisson ν son funciones periódicas en el espacio. Ya que el tratamiento descrito es válido, independiente de las propiedades que se consideren se hará mención

a una función periódica genérica denotada por $\epsilon(\mathbf{r})$ y puede ser escrita como:

$$\epsilon(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{G}} \epsilon(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}}, \quad (\text{B.12})$$

donde \mathbf{G} son los vectores de la red recíproca del cristal. Si se considera una onda plana con vector de onda \mathbf{k} que incide sobre el cristal, intuitivamente se puede suponer que la amplitud de la onda difractada por un elemento de volumen dV con vector de onda \mathbf{k}' depende directamente de las propiedades locales, de manera que la amplitud total de la onda difractada A esta dada por la integral sobre todo el sistema con $\epsilon(\mathbf{r})dV$ veces el factor de fase $e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}}$, por lo tanto:

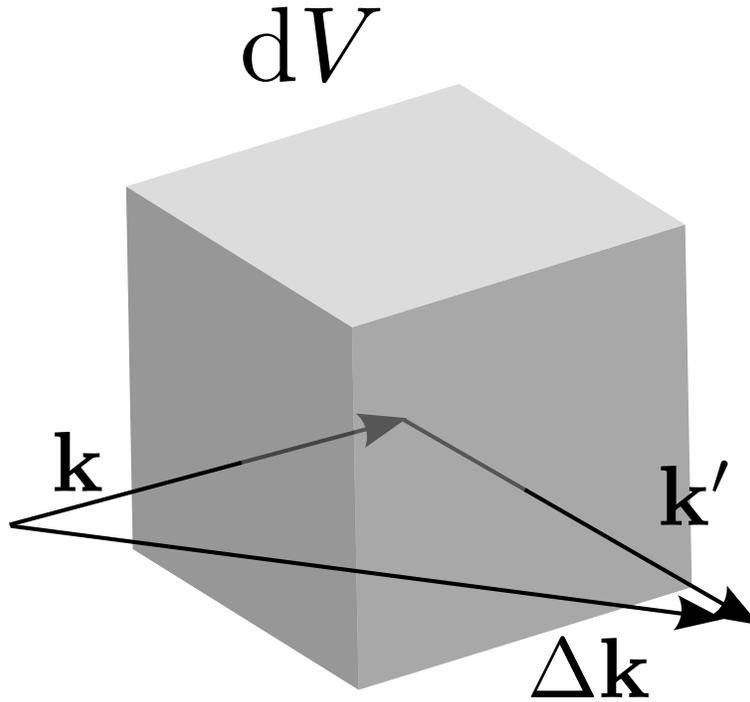


Figura B.3. Difracción de una onda plana por un elemento de volumen dV .

$$\begin{aligned} A &= \int e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) dV, \\ A &= \int e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{r}) dV, \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

donde:

$$\mathbf{k} - \Delta\mathbf{k} = \mathbf{k}'. \quad (\text{B.14})$$

Como se ve en la Figura B.3, $\Delta\mathbf{k}$ representa la diferencia de fase, es decir, el cambio en el vector de onda del haz dispersado respecto al haz incidente. Y ya sabemos que $\epsilon(\mathbf{r})$ es una función periódica,

de manera que podemos introducirla en (B.13) en términos de sus coeficientes de Fourier dados por (B.12), así que:

$$A = \int e^{-i\Delta\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{G}} \epsilon(\mathbf{G}) e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} dV,$$

lo cual puede reescribirse como:

$$A = \sum_{\mathbf{G}} \int e^{i(\mathbf{G}-\Delta\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} \epsilon(\mathbf{G}) dV, \quad (\text{B.15})$$

observemos que cuando la diferencia de fase $\Delta\mathbf{k}$ es igual a un vector de red recíproca particular tal que:

$$\Delta\mathbf{k} = \mathbf{G}, \quad (\text{B.16})$$

el término exponencial en (B.15) desaparece de modo que $A = \epsilon(\mathbf{G})V$. En desarrollos análogos hechos para cristales electrónicos [81] se puede demostrar fácilmente que (B.15) es muy pequeño cuando $\Delta\mathbf{k}$ es significativamente distinto de \mathbf{G} . Ahora, tenemos que la frecuencia $\omega' = ck'$ del rayo difractado es igual a la frecuencia $\omega = ck$ del rayo incidente, de manera que las magnitudes de los vectores de onda $k = |\mathbf{k}|$ y $k' = |\mathbf{k}'|$ son iguales y por lo tanto $k^2 = k'^2$. Retomando (B.14) y (B.16) encontramos que:

$$\mathbf{k} - \mathbf{G} = \mathbf{k}',$$

entonces:

$$\begin{aligned} (\mathbf{k} - \mathbf{G})^2 &= k'^2, \\ 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} - G^2 &= 0. \end{aligned}$$

Este resultado se conoce como la **condición de difracción** y dado que \mathbf{G} es un vector de la red recíproca al igual que $-\mathbf{G}$ podemos reescribir la relación anterior como:

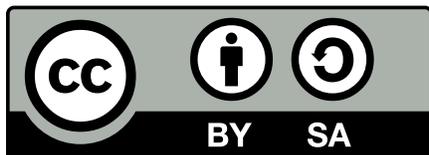
$$2\mathbf{k} \cdot \mathbf{G} = G^2, \quad (\text{B.17})$$

se observa que esta condición se satisface siempre que:

$$\mathbf{k} = \pm \frac{\mathbf{G}}{2}. \quad (\text{B.18})$$

Una importante anotación acerca de este resultado es que los \mathbf{k} que satisfacen la condición de difracción se encuentran en los extremos de la primera zona de Brillouin de la red recíproca con vector de red \mathbf{G} .

Licencia y Créditos de Figuras



Todo el contenido de este trabajo, salvo el Anexo B y la Figura 7.6, se comparte bajo una licencia Creative Commons Atribución-CompartirIgual 2.5 Colombia. Los contenidos que no pertenecen al autor no pueden ser usados bajo los términos de esta licencia.

Si desea enterarse de lo que significa esta licencia se sugiere el sitio web <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/2.5/co/>. Si desea conocer los términos legales de la licencia puede ver <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/2.5/co/legalcode>.

Créditos de Figuras

- Hipótesis de deformación plana 1.2 de la página 8, versión modificada de http://en.wikipedia.org/wiki/File:Plane_strain.svg
- Descripción de un material periódico en 3D 6.1 de la página 41, basada en [15].
- Descripción de un material periódico en 2D 6.2 de la página 42, basada en [15].
- Funciones Base para Elementos Finitos Lineales 6.4 de la página 48, basada en [103].
- Celda rectangular para una red hexagonal. 7.6 de la página 57, tomada de [108].

Bibliografía

- [1] Achenbach, J.D.: *Wave Propagation in Elastic Solids*. North Holland Publishing Company, 1973.
- [2] Aki, Keiiti: *Quantitative Seismology: Theory and Methods*, volumen 704. University Science Books, 3ª edición, 2002. ISBN-10: 0935702962.
- [3] Slawinski, Michael A.: *Waves and Rays in Elastic Continua*. World Scientific Publishing Company, 2ª edición, Septiembre 2010.
- [4] Landau, L.D. y E.M. Lifshitz: *Teoría de la Elasticidad*, volumen 7 de *Curso de Física Teórica*. Editorial Reverté, 6ª edición, 1982.
- [5] Arfken, George B., Hans J. Weber y Frank Harris: *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 6ª edición, 2005.
- [6] Brillouin, Leon: *Wave Propagation and Group Velocity*. Academic Press, 1ª edición, 1960.
- [7] Lighthill, M.J.: *Group Velocity*. Journal of The Institute of Mathematics and its Applications, 1:1–28, Noviembre 1964.
- [8] Timoshenko, Stephen y J.N. Goodier: *Theory of Elasticity*. McGraw-Hill, 3ª edición, 1970.
- [9] Reddy, J.N.: *An Introduction to the Finite Element Method*. McGraw-Hill, 3ª edición, 2005.
- [10] Bathe, Klaus Jurgen: *Finite Element Procedures*. Prentice Hall, 2ª edición, Junio 1995.
- [11] Zienkiewicz, O.C., R.L. Taylor y J.Z. Zhu: *The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals*, volumen 1. Butterworth-Heinemann, 6ª edición, 2005.
- [12] Reddy, J.N.: *Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering*. Krieger Publishing, 1ª edición, 1991.
- [13] Goldstein, Herbert, Charles P. Poole y John L. Safko: *Classical Mechanics*. Addison Wesley, 3ª edición, 2001.
- [14] Burden, Richard y Douglas Faires: *Análisis Numérico*. Thomson Learning, 7ª edición, 2002.

- [15] Langlet, Philippe: *Analyse de la Propagation des Ondes Acoustiques dans les Materiaux Periodiques a l'aide de la Methode des Elements Finis*. Tesis de Doctorado, L'Universite de Valenciennes et du Hainaut-Cambresis, 1993.
- [16] Pao, Yi Hsing y Vasundara Varatharajulu: *Huygens' principle, radiation conditions, and integral formulas for the scattering of elastic waves*. The Journal of the Acoustical Society of America, 59(6):1361–1371, 1976. <http://link.aip.org/link/?JAS/59/1361/1>.
- [17] Gómez, J., J. Jaramillo y D. Restrepo: *Evaluation of Numerical Alternatives for the Simulation of Wave Scattering Problems*. En *IX World Congress on Computational Mechanics*. Sydney, Australia, Julio 2010.
- [18] Semblat, J. F.: *Modeling seismic wave propagation and amplification in 1D/2D/3D linear and nonlinear unbounded media*. Int. Jal of Geomechanics, 11(6):440–448, Diciembre 2011.
- [19] Frankel, Arthur: *Three-dimensional Simulations of Ground Motions in the San Bernardino Valley, California, for Hypotetical Earthquakes on the San Andreas Fault*. Bulletin of the Seismological Society of America, 83:1020–1041, 1993.
- [20] Komatitsch, Dimitri y Jeroen Tromp: *Introduction to the spectral element method for three-dimensional seismic wave propagation*. Geophysical Journal International, 139:806–822, 1999.
- [21] Bielak, Jacobo, Kostas Loukakis, Yoshiaki Hisada y Chiaki Yoshimura: *Domain Reduction Method for Three-Dimensional Earthquake Modeling in Localized Regions, Part I: Theory*. Bulletin of the Seismological Society of America, 93:817–824, 2003.
- [22] Yoshimura, Chiaki, Jacobo Bielak Yoshiaki Hisada y Antonio Fernández: *Domain Reduction Method for Three-Dimensional Earthquake Modeling in Localized Regions, Part II: Verification and Applications*. Bulletin of the Seismological Society of America, 93:825–841, 2003.
- [23] Komatitsch, Dimitri, Qinya Liu, Jeroen Tromp, Peter Süss, Christiane Stidham y John H. Shaw: *Simulations of Ground Motion in the Los Angeles Basin Based upon the Spectral-Element Method*. Bulletin of the Seismological Society of America, 94(1):187–206, Febrero 2004.
- [24] Min, Dong Joo, Changsoo Shin, R. Gerhard Pratt y Hai Soo Yoo: *Weighted-Averaging Finite-Element Method for 2D Elastic Wave Equations in the Frequency Domain*. Bulletin of the Seismological Society of America, 93(2):904–921, 2003.
- [25] Frehner, Marcel, Stefan Schmalholz, Erik Saenger y Holger Steeb: *Comparison of finite difference and finite element methods for simulating two-dimensional scattering of elastic waves*. Physics of the Earth and Planetary Interiors, 171:112–121, 2008.
- [26] Lee, Shiann Jong, How Wei Chen, Qinya Liu, Dimitri Komatitsch, Bor Shouh Huang y Jeroen Tromp: *Three-Dimensional Simulations of Seismic-Wave Propagation in the Taipei Basin with Realistic Topography Based upon the Spectral-Element Method*. Bulletin of the Seismological Society of America, 98(1):253–264, Febrero 2008.

- [27] Lee, Shiann Jong, Dimitri Komatitsch, Bor Shouh Huang y Jeroen Tromp: *Effects of Topography on Seismic-Wave Propagation: An Example from Northern Taiwan*. Bulletin of the Seismological Society of America, 99(1):314–325, Febrero 2009.
- [28] Lee, Shiann Jong, Yu Chang Chan, Dimitri Komatitsch y Bor Shouh Huang Jeroen Tromp: *Effects of Realistic Surface Topography on Seismic Ground Motion in the Yangminshan Region of Taiwan Based Upon the Spectral-Element Method and LiDAR DTM*. Bulletin of the Seismological Society of America, 99(2):681–693, Abril 2009.
- [29] Ichimura, T., M. Hori y J. Bielak: *A hybrid multiresolution meshing technique for finite element three-dimensional earthquake ground motion modelling in basins including topography*. Geophysical Journal International, 177:1221–1232, 2009.
- [30] Käser, Martin, Cristobal Castro, Verena Hermann y Christian Pelties: *High Performance Computing in Science and Engineering*, capítulo SeisSol – A Software for Seismic Wave Propagation Simulations, páginas 281–292. Springer, 2009.
- [31] Bielak, Jacobo, Robert Graves, Kim Olsen, Ricardo Taborda, Leonardo Ramírez-Guzmán, Steven Day, Geoffrey Ely, Daniel Roten, Thomas Jordan, Philip Maechling, John Urbanic, Yifeng Cui y Gideon Juve: *The ShakeOut earthquake scenario: Verification of three simulation sets*. Geophysical Journal International, 180:375–404, 2010.
- [32] Chaljub, Emmanuel, Peter Moczo, Seiji Tsuno, Pierre Yves Bard, Jozef Kristek, Martin Käser, Marco Stupazzini y Miriam Kristekova: *Quantitative Comparison of Four Numerical Predictions of 3D Ground Motion in the Grenoble Valley, France*. Bulletin of the Seismological Society of America, 100(4):1427–1455, Agosto 2010.
- [33] Lan, Haiqiang y Zhongjie Zhang: *Three-Dimensional Wave-Field Simulation in Heterogeneous Transversely Isotropic Medium with Irregular Free Surface*. Bulletin of the Seismological Society of America, 101(3):1354–1370, 2011.
- [34] Cupillard, Paul, Elise Delavaud, Gaël Burgos, Geatano Festa, Jean Pierre Vilotte, Yann Capdeville y Jean Paul Montagner: *RegSEM: a versatile code based on the spectral element method to compute seismic wave propagation at the regional scale*. Geophysical Journal International, 188:1203–122, 2012.
- [35] Sepúlveda, Alonso: *Física Matemática*. Editorial Universidad de Antioquia, 1ª edición, 2009.
- [36] Sepúlveda, Alonso: *Electromagnetismo*. Editorial Universidad de Antioquia, 2009.
- [37] Manolis, G.D. y D.E. Beskos: *Boundary Element Methods in Elastodynamics*. Spon Press, 1ª edición, Diciembre 1988.
- [38] Sánchez-Sesma, Francisco y Michel Campillo: *Diffraction of P, SV, and Rayleigh waves by topographic features: A boundary integral formulation*. Bulletin of the Seismological Society of America, 81(6):2234–2253, 1991. <http://www.bssaonline.org/cgi/content/abstract/81/6/2234>.

- [39] Banerjee, Prasanta Kumar: *The Boundary Element Methods in Engineering*. McGraw-Hill College, 2ª edición, Enero 1994.
- [40] Sánchez-Sesma, Francisco y F. Luzón: *Seismic response of three-dimensional alluvial valleys for incident P, S and Rayleigh waves*. Bulletin of the Seismological Society of America, 85:269–284, 1995.
- [41] Janod, Francois y Olivier Coutant: *Seismic response of three-dimensional topographies using a time-domain boundary element method*. Geophysical Journal International, 603-614:142, 2000.
- [42] Iturrarán-Viveros, Ursula, Rossana Vai y Francisco Sánchez-Sesma: *Scattering of elastic waves by a 2-D crack using the Indirect Boundary Element Method (IBEM)*. Geophysical Journal International, 162:927–934, 2005.
- [43] Brebbia, C.A. y P. Georgiou: *Combination of boundary and finite elements for elastostatics*. Applied Mathematical Modelling, 3:212–220, 1979.
- [44] Beer, G. y J.L. Meek: *The coupling of boundary and finite element methods for infinite domain problems in elasticity*. Boundary element method, 1:575–591, 1981.
- [45] Zienkiewicz, O. C., D. W. Kelly y P. Bettess: *The Coupling of the Finite Element Method and Boundary Solution Procedures*. International Journal of Numerical Methods in Engineering, 11(2):355–375, 1977.
- [46] Boutchicha, D., O. Rahmani, M. Abdelkader, A. Sahli y A. Belarbi: *Merging of the indirect discrete boundary elements to the finite element analysis and its application to two dimensional elastostatics problems*. International Journal of Applied Engineering Research, 2:441–452, 2007.
- [47] Helldorfer, B., M. Haas y G. Kuhn: *Automatic coupling of a boundary element code with a commercial finite element system*. Advances in Engineering Software, 39:699–709, 2008.
- [48] Seghir, A., A. Tahakourt y G. Bonnet: *Coupling FEM and symmetric BEM for dynamic interaction of dam-reservoir systems*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 33:1201–1210, Junio 2009.
- [49] Bielak, Jacobo, Richard MacCamy, David McGhee y Ahmadou Barry: *Unified Symmetric BEM-FEM for Site Effects on Ground Motion – SH Waves*. Journal of Engineering Mechanics, 117:2265–2285., 2009.
- [50] Abaqus Inc, USA.: *ABAQUS User Subroutines Reference Manual version 6.10*, 2010.
- [51] Taylor, Robert: *FEAP/Programmer Manual version 8.3*. University of Berkeley, 2011.

- [52] Bouchon, Michel, Craig A. Schultz y M. Nail Tokstz: *A Fast Implementation of Boundary Integral Equation Methods to Calculate the Propagation of Seismic Waves in Laterally Varying Layered Media*. Bulletin of the Seismological Society of America, 85(6):1679–1687, Diciembre 1995.
- [53] Ostrowski, J., Z. Andjelic, M. Bebendorf, B. Crangănu-Cretu y J. Smajic: *Fast BEM-Solution of Laplace Problems With \mathcal{H} -Matrices and ACA*. IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS, 42(4):627–630, Abril 2006.
- [54] Abe, Kasuhisa, Kazuhiro Koro y Kayoko Itami: *An h -hierarchical Galerkin BEM using Haar wavelets*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 25:581–591, 2001.
- [55] Eppler, Karsten y Helmut Harbrecht: *Fast wavelet BEM for 3D electromagnetic shaping*. Applied Numerical Mathematics, 54:537–554, 2005.
- [56] Liu, Yijun: *Fast Multipole Boundary Element Method: Theory and Applications in Engineering*. Cambridge University Press, 1ª edición, 2009.
- [57] Fujiwara, Hiroyuki: *The fast multipole method for integral equations of seismic scattering problems*. Geophysical Journal International, 133(3):773–782, Junio 1998.
- [58] Fujiwara, Hiroyuki: *The fast multipole method for solving integral equations of three-dimensional topography and basin problems*. Geophysical Journal International, 140(1):198–210, Enero 2000.
- [59] Cheng, Alexander H. D. y Daisy T. Cheng: *Heritage and early history of the boundary element method*. Engineering Analysis with Boundary Elements, 29:268–302, 2005.
- [60] Bielak, Jacobo y Paul Christiano: *On the effective seismic input for non-linear soil-structure interaction systems*. Earthquake Engineering & Structural Dynamics, 12(1):107–119, 1984.
- [61] Duffy, Dean G.: *Green's Functions with Applications*. Chapman and Hall/CRC, 1ª edición, Mayo 2001. ISBN-10: 1584881100.
- [62] Lamb, H.: *On the propagation of tremors over the surface of an elastic solid*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London, A203:1–42, 1904.
- [63] Bouchon, Michel y Keiiti Aki: *Discrete wave-number representation of seismic-source wave fields*. Bulletin of the Seismological Society of America, 67(2):259–277, Abril 1977.
- [64] Katsikadelis, J.T.: *Boundary Elements: Theory and Applications*. Elsevier Science, 1ª edición, 2002.
- [65] Brebbia, C.A. y R. Butterfield: *Formal equivalence of direct and indirect boundary element methods*. Applied Mathematical Modelling, 2(2):132 – 134, 1978, ISSN 0307-904X. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TYC-484N7B4-17/2/e6cdc39c205d5b54b113d661a4bda124>.

- [66] Godinho, L., P. Amado Mendes, A. Tadeu, A. Cadena-Isaza, C. Smerzini, F. J. Sánchez-Sesma, R. Madec y D. Komatitsch: *Numerical Simulation of Ground Rotations along 2D Topographical Profiles under the Incidence of Elastic Plane Waves*. Bulletin of the Seismological Society of America, 99(2B):1147–1161, Mayo 2009.
- [67] Papageorgiou, Apostolos y Jaekwan Kim: *Study of the propagation and amplification of seismic waves in Caracas Valley with reference to the 29 July 1967 earthquake: SH waves*. Bulletin of the Seismological Society of America, 81(6):2214–2233, Diciembre 1991.
- [68] Hladky-Hennion, Anne Cristine. Comunicación Personal, 2011-2012.
- [69] Steeb, Holger: *Ultrasound propagation in cancellous bone*. Arch Appl Mech, 80:489–502, 2010.
- [70] Hladky-Hennion, Anne Christine y Jean Noël Decarpigny: *Analysis of the scattering of a plane acoustic wave by a doubly periodic structure using the finite element method: Application to Alberich anechoic coatings*. J. Acoust. Soc. Am, 90:3356–3367, 1991.
- [71] Banerjee, Biswajit: *An Introduction to Metamaterials and Waves in Composites*. Taylor & Francis, 1ª edición, Junio 2011.
- [72] Milton, Graeme, Marc Briane y John Willis: *On cloaking for elasticity and physical equations with a transformation invariant form*. New Journal of Physics, 8:248, 2006.
- [73] Gonella, Stefano y Massimo Ruzzene: *Analysis of in-plane wave propagation in hexagonal and re-entrant lattices*. Journal of Sound and Vibration, 312:125–139, 2008.
- [74] Fang, Nicholas, Dongjuan Xi, Jianyi Xu, Muralidhar Ambati, Werayout Sritauravanaivch, Cheng Sun y Xiang Zhang: *Ultrasonic metamaterials with negative modulus*. Nature Materials, 5:452–456, Junio 2006.
- [75] Diebels, Stefan, Tobias Ebinger y Holger Steeb: *An anisotropic damage model of foams on the basis of a micromechanical description*. Journal of Materials Science, 40:5919–5924, 2005.
- [76] Jänicke, Ralf y Holger Steeb: *Wave propagation in periodic microstructures by homogenisation of extended continua*. Computational Materials Science, In Press:In Press, 2011.
- [77] Jänicke, Ralf: *Micromorphic media: Interpretation by homogenisation*. Tesis de Doctorado, Universität des Saarlandes, 2010.
- [78] Eringen, A. Cemal: *Nonlocal Continuum Field Theories*. Springer-Verlag NewYork, 1ª edición, 2002. ISBN 0-387-95275-6.
- [79] Challamel, Noël, Lalaonirina Rakotomanana y Loïc Le Marrec.: *A dispersive wave equation using nonlocal elasticity*. C. R. Mecanique, 337:591–595., 2009.
- [80] Artan, R. y B.S. Altan: *Propagation of SV waves in a periodically layered media in nonlocal elasticity*. International Journal of Solids and Structures, 39(24):5927–5944, 2002.

- [81] Kittel, Charles: *Introduction to Solid State Physics*. Wiley, 7^a edición, 1996.
- [82] Ruzzene, Massimo, Fabrizio Scarpa y Francesco Soranna: *Wave beaming effects in two-dimensional cellular structures*. *Smart Materials and Structures*, 12:363–372, 2003.
- [83] Srikantha, A., J. Woodhouse y N.A. Flecka: *Wave propagation in two-dimensional periodic lattices*. *Journal of the Acoustical Society of America*, 119:1995–2005, 2006.
- [84] Aberg, M. y P. Gudmundson: *The usage of standard finite element codes for computation of dispersion relations in materials with periodic microstructure*. *Journal of the Acoustical Society of America*, 102:2007–2013, 1997.
- [85] Ashcroft, Neil W. y N. David Mermin: *Solid State Physics*. Brooks Cole, 1^a edición, Enero 1976.
- [86] Takehito, Takahashi y Sato Yasuo: *On the Theory of Elastic Waves in Granular Substance I*. *Bulletin of the Earthquake Research Institute, University of Tokyo*, 27:11–16, 1950.
- [87] Takehito, Takahashi y Sato Yasuo: *On the Theory of Elastic Waves in Granular Substance II*. *Bulletin of the Earthquake Research Institute, University of Tokyo*, 28:37–43, 1950.
- [88] Riccardi, Demian, Qiang Cui y George N. Phillips Jr: *Application of Elastic Network Models to Proteins in the Crystalline State*. *Biophysical Journal*, 96:464–475, Enero 2009.
- [89] Lee, Chul Ho, Kunihiro Kihou, Kazumasa Horigane, Satoshi Tsutsui, Tatsuo Fukuda, Hiroshi Eisaki, Akira Iyo, Hirotaka Yamaguchi, Alfred Q. R. Baron, Markus Braden y Kazuyoshi Yamada: *Effect of K Doping on Phonons in $Ba_{1-x}K_xFe_2As_2$* . *Journal of the Physical Society of Japan*, 79:014714, 2010.
- [90] Luthi, Pascal Olivier: *Lattice Wave Automata: From Radio Waves to Fractures Propagation*. Tesis de Doctorado, University of Geneva, 1998.
- [91] Xiao, Shaoping: *A lattice Boltzmann method for shock wave propagation in solids*. *Communications in Numerical Methods in Engineering*, 23:71–84, 2007.
- [92] Nabovati, Aydin, Daniel P. N Sellan y Cristina H. Amon: *On the lattice Boltzmann method for phonon transport*. *Journal of Computational Physics*, 230:5864–5876, 2011.
- [93] Weinan, E. y Zhongyi Huang: *A Dynamic Atomistic–Continuum Method for the Simulation of Crystalline Materials*. *Journal of Computational Physics*, 182:234–261, 2002.
- [94] Guarín, Nicolás y Juan Gómez: *Wave Propagation in Semi-infinite Domains Via the Hybrid Finite Element- Boundary Element Method*. En *VIII Congreso Colombiano en Métodos Numéricos*, 2011.
- [95] Gómez, Juan: *Numerical treatment of Cosserat based rate independent strain gradient plasticity theories*. *Ingeniería y Ciencia*, 4(8):99–128, 2008.

- [96] Francisco, Vélez H. y Gómez Juan: *Micropolar and Couple Stress modeling of elastic and inelastic media under length scale effects*. En *VIII Congreso Colombiano en Métodos Numéricos*, 2011.
- [97] Gómez, Juan, Francisco J. Vélez y Nicolás Guarín: *Numerical Simulation of Wave Propagation Problems in Semi-infinite Micropolar Solids*. En *VIII Congreso Colombiano en Métodos Numéricos*, 2011.
- [98] Gutiérrez-Loaiza, Yhefferson: *Estructura de bandas en un cristal fotónico bidimensional*. Ingeniería Física, Universidad EAFIT, 2011.
- [99] Villegas, Edward: *Modelización y Simulación Numérica de Efectos de Confinamiento en el Grafeno*. Ingeniería Física, Universidad EAFIT, 2011.
- [100] Brillouin, Leon: *Wave propagation in periodic structures: Electric filters and crystal lattices*. Dover Publications, 1ª edición, 1953.
- [101] Kreyzsig, Erwin: *Introductory Functional Analysis with Applications*. Wiley, 1ª edición, 1989.
- [102] Gockenbach, Mark S.: *Partial Differential Equations: Analytical and Numerical Methods*. SIAM, 2002.
- [103] Sukumar, N. y J. E. Pask: *Classical and enriched Finite element formulations for Bloch-periodic boundary conditions*. International Journal of Numerical Methods in Engineering, 77(8):1121–1138, Febrero 2009.
- [104] Johnson, Steven G.: *Notes on the algebraic structure of wave equations*. Informe técnico, Massachusetts Institute of Technology, 2010.
- [105] Poole, David: *Álgebra lineal: una introducción moderna*. Cengage Learning Editores, 2ª edición, 2007. ISBN 9706865950.
- [106] Rayleigh, Lord: *On the remarkable phenomenon of crystalline reflexion described by Prof. Stokes*. Philosophical Magazine Series 5, 26(160):256–265, 1888.
- [107] Kushwaha, M.S., P. Halevi, L. Dobrzynski y B. Djafari-Rouhani: *Acoustic Band Structure of Periodic Elastic Composites*. Physical Review Letters, 71(13):2022–2025, 1993.
- [108] Ostoja-Starzewski, Martin: *Lattice models in micromechanics*. Appl Mech Rev, 55(1):35–60, Enero 2002.
- [109] Luo, Ma, Qing Huo Liu y Zhibing Li: *Spectral element method for band structures of two-dimensional anisotropic photonic crystals*. Physical Review E, 79:026705, Febrero 2009.
- [110] Luo, Ma y Qing Huo Liu: *Accurate determination of band structures of two-dimensional dispersive anisotropic photonic crystals by the spectral element method*. Journal of The Optical Society of America, 26(7):1598–1605, Julio 2009.

- [111] Luo, Ma y Qing Huo Liu: *Spectral element method for band structures of three-dimensional anisotropic photonic crystals*. Physical Review E, 80:056702, Noviembre 2009.
- [112] Joannopoulos, John, Steven Johnson, Joshua Winn y Robert Meade: *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton University Press, 2ª edición, 2008.
- [113] Goodman, Joseph: *Introduction To Fourier Optics*. McGraw-Hill Science/Engineering/Math, 2ª edición, 1996.