

DISEÑO COMPUTACIONAL DE METAMATERIALES ULTRARÍGIDOS Y ULTRALIVIANOS

Juan M. Podestá^{a,b}, Alfredo E. Huespe^b, Carlos G. Méndez^c y Victor D. Fachinotti^b

^a*Dpto. de Mecánica Aplicada, Facultad de Ingeniería, Universidad Nacional del Nordeste. Las Heras 727, 3500, Resistencia Chaco. jmapodesta@gmail.com*

^b*Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), Universidad Nacional del Litoral (UNL) - Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Predio CONICET "Dr. Alberto Cassano", Colectora Ruta Nac. 168 s/n, Paraje El Pozo, 3000, Santa Fe, Argentina*

^c*Fundación CIMNE Latinoamérica. Iturraspe 785, 3000, Santa Fe*

Palabras Clave: Optimización Libre de Material, Derivada Topológica, Metamateriales, Clases de Simetría.

Resumen. Este trabajo presenta un procedimiento numérico-computacional para el diseño de metamateriales de utilización estructural. El procedimiento recurre a dos metodologías que, aunque conocidas en la literatura, no han sido exploradas conjuntamente: Optimización Libre del Material (en su denominación inglesa esta técnica es conocida como: Free Material Optimization - FMO) y diseño topológico de microestructuras. FMO ha surgido como una herramienta de optimización para el diseño estructural. El método está basado en un algoritmo de búsqueda del campo tensor de elasticidad efectivo $C(x)$ que define la estructura más óptima para un problema dado, teniendo como variable de diseño todas las componentes del tensor elástico del material y asumiendo el caso de anisotropía más general posible. Una restricción característica de este problema de optimización es la que impone que el tensor de elasticidad sea semidefinido positivo en cada punto de la estructura. Este tipo de problemas de optimización demanda la utilización de esquemas basados en Programación no-lineal SemiDefinida (SDP), donde las restricciones son de tipo matricial. Con la solución del problema FMO se diseña la microestructura del metamaterial. Para ello, utilizamos un algoritmo basado en Derivada Topológica adoptando un compuesto bifásico. Se presentan aplicaciones numéricas que muestran la capacidad de este procedimiento como herramienta para el diseño de metamateriales. El resultado es un material celular graduado.

1. INTRODUCCIÓN

El objetivo de este trabajo es presentar una herramienta para diseño óptimo de metamateriales ultrarígidos y ultralivianos en problemas estructurales, optimizando el tensor de elasticidad efectivo $C(\boldsymbol{x})$ en todo el dominio macroscópico del problema y diseñando la microestructura mediante la aplicación de conceptos de multiescala.

Recientes trabajos como [Zheng et al. \(2014\)](#) proponen métodos de fabricación de materiales ultrarígidos y ultralivianos, genéricamente denominados metamateriales. En virtud de dichos avances, el diseño computacional de metamateriales para problemas específicos toma vital importancia para la gran cantidad de posibles aplicaciones.

Para la optimización estructural a nivel macroscópico se utiliza el procedimiento llamado Optimización Libre de Material (*Free Material Optimization* - FMO) que tiene como variables de diseño las componentes independientes del tensor de elasticidad efectivo $C(\boldsymbol{x})$ en todos los puntos \boldsymbol{x} del dominio. Los primeros conceptos de este método fueron introducidos por [Bendsoe et al. \(1994\)](#) y ampliados en [Zowe et al. \(1997\)](#) y [Ben-Tal et al. \(2000\)](#). El problema estándar en FMO consiste en minimizar la flexibilidad (*compliance*) o una pseudodensidad dada por la integral de la traza de $C(\boldsymbol{x})$ en todo el dominio. Aplicaciones más recientes, como [Kočvara y Stingl \(2007\)](#) y [Kočvara y Stingl \(2012\)](#), con restricción adicional del problema como máxima tensión admisible o máxima deformación admisible.

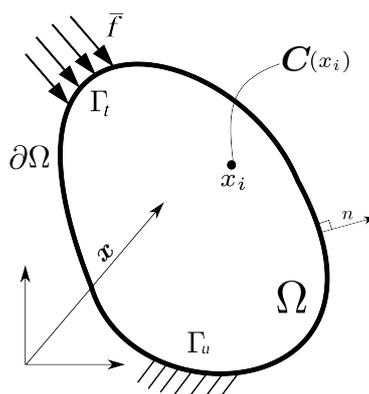
La optimización mediante FMO no restringe las posibles simetrías de los tensores $C(\boldsymbol{x})$, por el contrario las componentes son totalmente independientes y sólo se preserva la simetría mayor. Esto lleva a que en los puntos del dominio pueden obtenerse tanto tensores isotrópicos como tensores con anisotropía completa. De esta manera los tensores obtenidos pueden presentar cualquier clase de simetría (isotrópicos, ortotrópicos, etc) que es desconocida a priori. El diseño de la microestructura puede ser simplificado si se conoce el valor del tensor constitutivo orientado en sus ejes de simetría. Para conseguir este objetivo, los resultados que arroja FMO se postprocesan utilizando la reconstrucción de tensores propuesta por [Auffray y Ropars \(2016\)](#). De allí se puede reconocer la clase de simetría a la que cada tensor $C(\boldsymbol{x})$ posee y el ángulo θ por el cual se encuentra rotado.

El diseño de la microestructura del metamaterial se realiza con la aplicación de un algoritmo basado en Derivada Topológica propuesto en [Amstutz et al. \(2010\)](#). Este procedimiento permite obtener, para un Elemento de Volumen Representativo (*Representative Volume Element* - RVE), una topología que sea capaz de reproducir el tensor efectivo dado. En cada RVE, este tensor se estima mediante una formulación multiescala estándar, donde las tensiones y las deformaciones a nivel macroscópico son un promedio, sobre el volumen, de los valores análogos a nivel microscópico.

El trabajo se encuentra organizado de la siguiente forma: La optimización del dominio macroscópico se describe en la Sec. 2. Mediante el procedimiento descrito en la Sec. 3 se analiza la clase de simetría del tensor elástico $C(\boldsymbol{x})$ en cada punto \boldsymbol{x} del dominio. En la Sec. 4 se describe el paso final del procedimiento, que consta de la realización del diseño microestructural en cada punto. Las simulaciones numéricas y los resultados obtenidos se presentan en la Sec. 5. Por último, en la Sec. 6 se presentan las conclusiones y la discusión de los resultados.

2. OPTIMIZACIÓN LIBRE DE MATERIAL

El método de Optimización Libre de Material (FMO) trabaja sobre problemas de estructuras elásticas. Las variables de diseño son las propiedades de los materiales, particularmente las componentes independientes de cada tensor elástico $C(\boldsymbol{x})$, con la restricción de ser semi-

Figura 1: Dominio macroscópico Ω .

definido positivo y preservar la simetría mayor. De este modo, en estado plano, el tensor $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ tiene seis parámetros libres. La función a minimizar puede ser la flexibilidad (*compliance*) de la estructura o una pseudodensidad dada por la integral de la traza en todo el dominio.

2.1. El problema elástico

Consideramos problemas planos de elasticidad. Sea Ω un dominio finito que pertenece a \mathbb{R}^2 ; Γ_u el contorno con condiciones de borde Dirichlet, Γ_t el contorno con condiciones de borde Neumann, tal que $\Gamma_u \cup \Gamma_t = \partial\Omega$ y $\Gamma_u \cap \Gamma_t = \emptyset$. Sea $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}) = (u_1(\mathbf{x}), u_2(\mathbf{x}))$ el vector desplazamiento en la estructura y $\boldsymbol{\varepsilon} = \nabla_{\mathbf{x}}^s \bar{\mathbf{u}}$ el tensor de deformación.

Adoptando la ley de Hooke como relación constitutiva, el tensor de tensiones $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ será:

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{C} : \boldsymbol{\varepsilon} . \quad (1)$$

El tensor de cuarto orden $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ y los tensores de segundo orden $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ y $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ pueden ser expresados mediante la notación de Voigt-Mandel:

$$\mathbf{C}(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & \sqrt{2}C_{1112} \\ & C_{2222} & \sqrt{2}C_{2212} \\ \text{sym} & & 2C_{1212} \end{pmatrix} , \quad (2)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) = (\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sqrt{2}\sigma_{12})^T , \quad (3)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) = (\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \sqrt{2}\varepsilon_{12})^T . \quad (4)$$

Dados el campo $\mathbf{C}(\mathbf{x})$ y una función $\bar{\mathbf{f}}$ de fuerzas externas aplicada sobre Γ_n , el sistema estará en equilibrio para un campo $\bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x})$ que resuelva la ecuación convencional discreta (mediante Elementos Finitos) dada por

$$\mathbf{K}(\mathbf{C})\mathbf{u} - \mathbf{f} = 0 , \quad (5)$$

donde \mathbf{f} es la función de fuerzas discretizada, y \mathbf{u} el campo de desplazamientos discretizado.

2.2. Minimización de la traza

Un problema típico de optimización estructural consiste en minimizar el volumen de una estructura con la condición de que cumpla cierta rigidez mínima.

Consideremos la traza del tensor de elasticidad expresado en la Ec. (2), $tr(\mathbf{C}(\mathbf{x})) = C_{11} + C_{22} + 2C_{33}$. En FMO, minimizar la traza en todo el dominio puede entenderse como buscar una pseudodensidad mínima para el problema en cuestión (Kočvara y Stingl (2007), Bendsoe et al. (1994)). A pesar de no haber una relación directa entre traza y densidad, es claro que al optimizar el valor de \mathbf{C}^e en cada elemento finito, a menor traza, menor va a ser la cantidad de material necesario para diseñar la microcelda correspondiente. Así, en la microescala se logra una microestructura resistente a densidad mínima. El problema de minimización se escribe:

$$\min_{(\mathbf{C}, \mathbf{u})} J^{tr} = \min_{(\mathbf{C}, \mathbf{u})} \int_{\Omega} tr(\mathbf{C}(\mathbf{x})) d\Omega \quad (6a)$$

$$\text{t.q. } \mathbf{C}(\mathbf{x}) \succeq 0 \quad (6b)$$

$$0 < \rho_{min} \leq tr(\mathbf{C}) \leq \rho_{max} \quad (6c)$$

$$K(\mathbf{C}(\mathbf{x}))\mathbf{u} - \mathbf{f} = 0 \quad (6d)$$

$$\mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \leq \gamma_{compl} \quad (6e)$$

La restricción dada por la Ec. (6b) consiste en el cono de matrices en $\mathbb{R}^{3 \times 3}$ simétricas semi-definidas positivas. De esta manera se asegura un resultado físicamente consistente. Mediante la restricción de caja planteada en la Ec. (6c), la traza $tr(\mathbf{C}(\mathbf{x}))$ se encuentra acotada, superiormente para evitar un material inadmisiblemente rígido, y por abajo para evitar un valor cercano a cero, para prevenir singularidades en la solución del problema de equilibrio. La Ec. (6d) es la ecuación convencional del equilibrio del problema elástico lineal. $K(\mathbf{C}(\mathbf{x}))$ es la matriz de rigidez que surge de la discretización de elementos finitos. Por último en la Ec. (6e) representa el trabajo externo, y es acotado mediante un factor γ_{compl} definido más adelante.

2.3. Minimización de la flexibilidad

Una forma alternativa de escribir el problema 6 consiste en maximizar la rigidez estructural (minimizar la flexibilidad). Se escribe entonces:

$$\min_{(\mathbf{C}, \mathbf{u})} J^f = \min_{(\mathbf{C}, \mathbf{u})} \mathbf{f} \cdot \mathbf{u} \quad (7a)$$

$$\text{t.q. } \mathbf{C}(\mathbf{x}) \succeq 0 \quad (7b)$$

$$0 < \rho_{min} \leq tr(\mathbf{C}) \leq \rho_{max} \quad (7c)$$

$$K(\mathbf{C}(\mathbf{x}))\mathbf{u} - \mathbf{f} = 0 \quad (7d)$$

$$\int_{\Omega} tr(\mathbf{C}(\mathbf{x})) d\Omega \leq \gamma_{tr} \quad (7e)$$

Al maximizar rigidez es necesario acotar la pseudodensidad, lo que se ve reflejado en la restricción dada por la Ec.(7e). Aquí las Ecs. (7b), (7c) y (7d) son las mismas restricciones que en el problema dado por la Ec. (6). El factor γ_{tr} será definido posteriormente.

2.4. Metodologías de optimización SAND y NAND

En ambas formulaciones (Ecs. (6) y (7)) las variables son el tensor elástico \mathbf{C} y los desplazamientos \mathbf{u} . Esta forma de resolver el problema corresponde a una formulación del tipo SAND: *Simultaneous Analysis and Design*. La función objetivo es lineal en las variables a optimizar, sin

embargo la restricción de equilibrio es no-lineal - no-convexa.

Resolviendo el campo de desplazamientos \mathbf{u} de las Ecs.(6d) o (7d): $\mathbf{u} = \mathbf{K}(\mathbf{C}(\mathbf{x}))^{-1} \mathbf{f}$ y resolviendo en las Ecs. (6e) y (7d), resultan las reformulaciones de los problemas dados en las Ecs. (6) y (7), respectivamente, que se describen a continuación:

$$\min_{(\mathbf{C})} J^{tr} = \min_{(\mathbf{C})} \int_{\Omega} tr(\mathbf{C}(\mathbf{x})) d\Omega \quad (8a)$$

$$(8b)$$

$$\text{t.q. } \mathbf{C}(\mathbf{x}) \succeq 0 \quad (8c)$$

$$0 < \rho_{min} \leq tr(\mathbf{C}) \leq \rho_{max} \quad (8d)$$

$$\mathbf{f} \cdot \mathbf{K}(\mathbf{C}(\mathbf{x}))^{-1} \mathbf{f} \leq \gamma_{compl} ; \quad (8e)$$

$$\min_{(\mathbf{C})} J^f = \min_{(\mathbf{C})} \mathbf{f} \cdot \mathbf{K}(\mathbf{C}(\mathbf{x}))^{-1} \mathbf{f} \quad (9a)$$

$$(9b)$$

$$\text{t.q. } \mathbf{C}(\mathbf{x}) \succeq 0 \quad (9c)$$

$$0 < \rho_{min} \leq tr(\mathbf{C}) \leq \rho_{max} \quad (9d)$$

$$\int_{\Omega} tr(\mathbf{C}(\mathbf{x})) d\Omega \leq \gamma_{tr} . \quad (9e)$$

Estas formulaciones determinan una metodología de optimización *NAND: Nested Analysis and Design*. Como ventaja de resolver el problema original a través de un procedimiento NAND, se obtiene en cada iteración del algoritmo de optimización una estructura estáticamente admisible y como las restricciones dadas en las Ecs. (8) y (9) son convexas (no estrictos, ver [Kočvara y Stingl \(2007\)](#)), los problemas dados en las Ecs. (8) y (9) resultan convexas.

Para resolver los problemas planteados en las Ecs. (8) y (9) el algoritmo de optimización utilizado es el *Feasible Arc Interior Point Algorithm* (FAIPA) ([Herskovits et al. \(2005\)](#)). Esta técnica para problemas con restricciones de igualdad y desigualdad no-lineales, requiere un punto inicial que cumpla las desigualdades y genera una secuencia de puntos interiores. Cuando el problema tiene solo restricciones de desigualdad, la función objetivo es reducida en cada iteración.

3. DETERMINACIÓN DE LA CLASE DE SIMETRÍA DE TENSORES.

En el reciente trabajo [Auffray y Ropars \(2016\)](#) se exponen cuatro clases de simetría a las que los tensores elásticos de cuarto orden pueden pertenecer en problemas 2D (ver también [Forte y Vianello \(2014\)](#), [He y Zheng \(1996\)](#), [Vianello \(1997\)](#)). En cada clase de simetría el tensor constitutivo tiene $\#_{ind}$ cantidad de variables independientes (Tabla 1).

La solución del algoritmo FMO provee como resultado un tensor constitutivo \mathbf{C}_{FMO}^e orientado según las direcciones del sistema de coordenadas global del problema. En la Fig. (2) se esquematiza una microestructura con periodicidad cuya orientación coincide con un sistema coordinado local de simetría $\{x_1^{Ls}, x_2^{Ls}\}$. Este sistema se encuentra rotado un ángulo θ respecto al sistema global $\{x_1^G, x_2^G\}$. Cuando el RVE se elije orientado en función del sistema local, tiene

Periodicidad	Clase	# <i>ind</i>
Diagonal	$[Z_2]$	6
Ortotrópico	$[D_2]$	4
Tetragonal	$[D_4]$	3
Isotrópico	$[O_{(2)}]$	2

Tabla 1: Clases de simetrías (Auffray y Ropars (2016))

mayor facilidad de capturar la periodicidad del material. Por lo tanto, para facilitar el diseño de la microestructura es conveniente reorientar los tensores elásticos obtenidos en FMO.

En la presente sección se detalla el procedimiento para determinar la clase de simetría de cada tensor y calcular el ángulo θ necesario para rotar dicho tensor C_{FMO}^e a un sistema que coincida con los ejes de simetría del material.

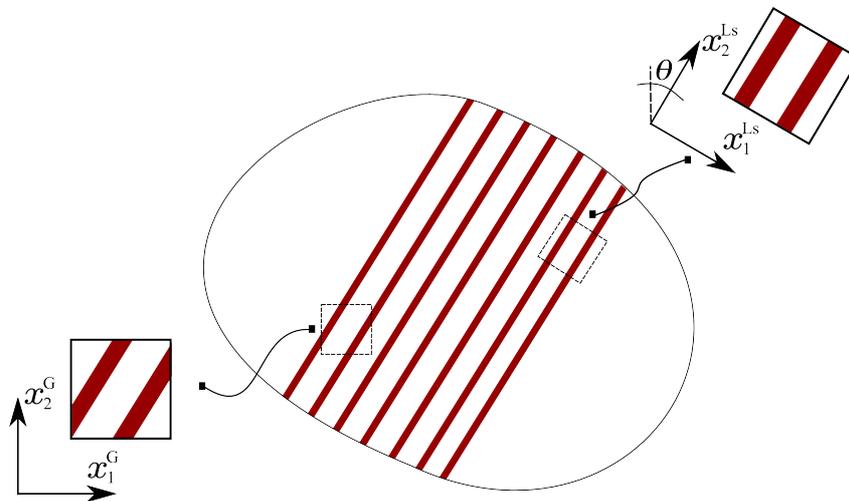


Figura 2: Material con ejes de simetría no coincidentes con ejes globales. Posibles elecciones del RVE.

3.1. Reorientación del tensor C_{FMO}^e a una base que coincide con los ejes de simetría del material

Para aliviar la notación, en esta sección se identifica al tensor C_{FMO}^e con el tensor C . El ángulo que existe entre la base cartesiana global y la base local asociada a los ejes de simetría del material es llamado θ . En las Ecs. (10) se calculan los tensores D_{ijkl} , a_{ij} y los coeficientes

λ y μ (Vianello (1997))

$$\begin{aligned}
 D_{ijkl} = & C_{ijkl} - \frac{1}{6}(\delta_{ij}C_{kplp} + \delta_{kl}C_{ipjp} + \delta_{ik}C_{lpjp} \\
 & + \delta_{lj}C_{ipkp} + \delta_{il}C_{jpkp} + \delta_{jk}C_{iplp}) \\
 & + \frac{C_{ppqq}}{12}(5\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}) \\
 & - \frac{C_{ppqq}}{8}(3\delta_{ij}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{jk}), \\
 a_{ij} = & \frac{1}{12}(2C_{ipjp} - C_{ppqq}\delta_{ij}), \\
 \lambda = & \frac{1}{8}(3C_{ppqq} - 2C_{ppqq}), \\
 \mu = & \frac{1}{8}(2C_{ppqq} - C_{ppqq}).
 \end{aligned} \tag{10}$$

Siendo

$$R = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

las Ecs. (10) permiten calcular los invariantes del tensor C

$$\begin{aligned}
 I_1 &= \lambda + \mu, \\
 J_1 &= \mu, \\
 I_2 &= a_{pq}a_{pq}, \\
 J_2 &= D_{pqrs}D_{pqrs}, \\
 I_3 &= a_{pq}D_{pqrs}a_{rs}, \\
 J_3 &= R_{pq}a_{qr}D_{prst}a_{st}.
 \end{aligned} \tag{11}$$

Además, definiendo los coeficientes

$$\begin{aligned}
 a_1 &= \frac{1}{2}(a_{11} - a_{22}), \\
 a_2 &= \frac{1}{2}(a_{12} + a_{21}), \\
 d_1 &= \frac{\sqrt{8}}{8}(D_{1111} + D_{2222} - D_{1122} - D_{1212} \\
 &\quad - D_{2112} - D_{2121} - D_{1221} - D_{2211}), \\
 d_2 &= \frac{\sqrt{8}}{8}(D_{1112} + D_{1121} + D_{1211} + D_{2111} \\
 &\quad - D_{2221} - D_{2212} - D_{2122} - D_{1222}),
 \end{aligned}$$

se calculan los valores

$$\begin{aligned}
 \alpha &= \frac{1}{2} \tan^{-1} \left(\frac{a_2}{a_1} \right), \\
 \beta &= \frac{1}{4} \tan^{-1} \left(\frac{d_2}{d_1} \right),
 \end{aligned} \tag{12}$$

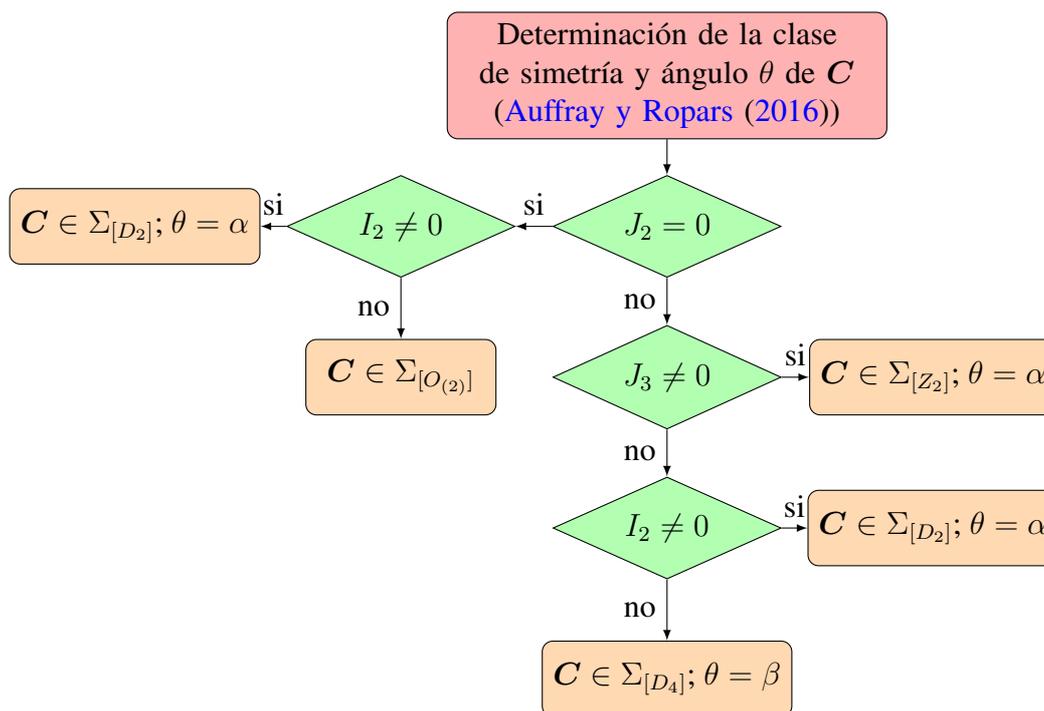


Figura 3: Obtención de la clase de simetría. Auffray y Ropars (2016)

que serán utilizados para determinar el ángulo θ .

La determinación de la clase de simetría y el ángulo θ de cada tensor se ordena en el procedimiento detallado en la Fig. (3), donde $\Sigma_{[G]}$ indica el grupo de tensores que pertenecen al grupo de simetría G . Cuando un tensor es de clase $O_{(2)}$ (isotrópico) todas son direcciones de simetría, por lo que no hace falta calcular θ . Se define un tensor de rotación:

$$Q = \begin{pmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) & 0 \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{13}$$

que es función de θ . Por último se realiza el cálculo de reorientación del tensor C a los ejes de simetría utilizando la siguiente transformación tensorial

$$C_{pqrs}^* = Q_{pi}Q_{qj}Q_{rk}Q_{sl}C_{ijkl} \tag{14}$$

obteniendo el tensor C^* que será el utilizado para diseñar la microestructura.

4. DISEÑO TOPOLÓGICO DE LA MICROESCALA DEL MATERIAL

El siguiente paso consiste en diseñar la topología microestructural del metamaterial en base a lo obtenido en FMO y luego de la correspondiente reorientación del tensor de elasticidad. Para ello se adopta un compuesto bifásico: un material 1 de gran rigidez y un material 2 de gran flexibilidad. En el contexto de diseño de la microescala, la optimización topológica busca la óptima distribución de las fases en el interior de un dominio prescripto. Este dominio consiste en un Elemento de Volumen Representativo (RVE). La función costo tiene como objetivo, mediante el diseño topológico, igualar el tensor de elasticidad efectivo del RVE con el que demanda la solución obtenida mediante FMO.

4.1. Homogenización de propiedades efectivas.

Definiendo Ω_μ como el dominio del RVE, se establece un sistema de referencia en la microescala donde un punto material dentro de Ω_μ se caracteriza por su vector posición \mathbf{y} .

Como hipótesis fundamental del análisis multiescala, tanto el campo de deformación $\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x})$ como el de tensión $\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x})$ en un punto arbitrario \mathbf{x} del dominio macroscópico Ω resultan ser, el promedio volumétrico del tensor de deformación $\boldsymbol{\varepsilon}_\mu(\mathbf{y})$ y tensión $\boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y})$ a nivel de la microescala sobre el RVE:

$$\boldsymbol{\varepsilon}(\mathbf{x}) := \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\varepsilon}_\mu(\mathbf{y}) d\Omega_\mu, \quad (15)$$

$$\boldsymbol{\sigma}(\mathbf{x}) := \frac{1}{|\Omega_\mu|} \int_{\Omega_\mu} \boldsymbol{\sigma}_\mu(\mathbf{y}) d\Omega_\mu, \quad (16)$$

siendo $|\Omega_\mu| := \int_{\Omega_\mu} d\Omega_\mu$. El promedio volumétrico definido en las Ecs. (15) y (16) se denomina comúnmente proceso de homogeneización.

Por último, el tensor efectivo homogeneizado se calcula según la Ec. (17), mediante la evaluación de tres tensiones macro homogeneizadas $\boldsymbol{\sigma}_1$, $\boldsymbol{\sigma}_2$ y $\boldsymbol{\sigma}_3$ para valores específicos de deformación macro $\boldsymbol{\varepsilon}_1$, $\boldsymbol{\varepsilon}_2$ y $\boldsymbol{\varepsilon}_3$ respectivamente:

$$\mathbf{C}^{hom} = [\boldsymbol{\sigma}_1(\boldsymbol{\varepsilon}_1), \boldsymbol{\sigma}_2(\boldsymbol{\varepsilon}_2), \boldsymbol{\sigma}_3(\boldsymbol{\varepsilon}_2)], \quad (17)$$

expresado en notación de Voigt-Mandel. Las deformaciones $\boldsymbol{\varepsilon}_i$ representan una base canónica del espacio de las deformaciones:

$$\boldsymbol{\varepsilon}_1 = e_x \otimes e_x \quad (18a)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_2 = e_y \otimes e_y \quad (18b)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon}_3 = e_x \otimes^s e_y. \quad (18c)$$

4.2. Diseño mediante Derivada Topológica

El diseño de la microestructura del metamaterial se obtiene mediante un algoritmo que utiliza Derivada Topológica y función *level set* basado en el trabajo de Amstutz et al. (2010). Asumamos un compuesto constituido por dos fases cuyas propiedades se definen mediante una elasticidad \mathbf{C}^* para una fase y una elasticidad $\gamma^* \mathbf{C}^*$ para la segunda fase, donde γ^* es un factor de contraste (Fig. (4)).

Por lo tanto el campo del tensor elástico en la microescala está dado por:

$$\mathbf{C}_\mu(\mathbf{y}) = \begin{cases} \mathbf{C}^* & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^1; \\ \gamma^* \mathbf{C}^* & \forall \mathbf{y} \in \Omega_\mu^2. \end{cases} \quad (19)$$

Donde Ω_μ^1 y Ω_μ^2 denotan los dominios ocupados por los materiales 1 y 2 respectivamente. La distribución de ambos materiales en el RVE resulta como solución del problema de optimización dado en la siguiente ecuación:

$$\min_{(\Omega_\mu^1)} h_\mu(\mathbf{C}^{hom}) = \min_{(\Omega_\mu^1)} \|\mathbf{C}_{FMO}^e - \mathbf{C}^{hom}\|^2. \quad (20)$$

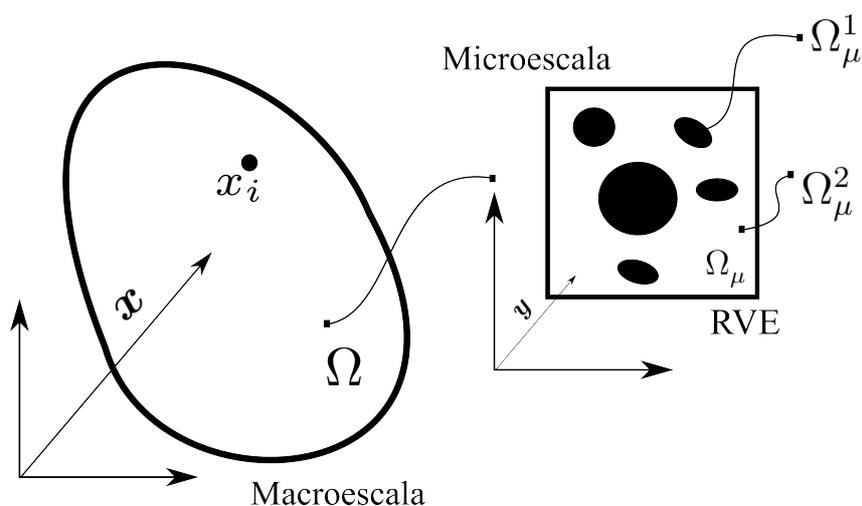


Figura 4: Continuo macroscópico y microestructura en un punto.

La función costo se define como: $h_\mu = \| \mathbf{C}_{FMO}^e - \mathbf{C}^{hom} \|^2$, siendo \mathbf{C}_{FMO}^e el tensor elástico del elemento finito e determinado según FMO y \mathbf{C}^{hom} el tensor efectivo homogeneizado. Se entiende que la variable de diseño en el problema de la Ec. (20) es la topología del dominio Ω_μ^1 , es decir la distribución de material de la fase 1. La derivada topológica de h_μ respecto de la fracción de volumen Ω_μ^1 en un punto arbitrario $\mathbf{y} \in \Omega_\mu$ es

$$D_T h_\mu(\mathbf{y}) = -2 (\mathbf{C}_{FMO}^e - \mathbf{C}^{hom}) : D_T \mathbf{C}(\mathbf{y}) . \quad (21)$$

La Ec. (21) mide la sensibilidad de h_μ cuando los materiales 1 y 2 se intercambian dentro del RVE. $D_T \mathbf{C}(\mathbf{y})$ es la derivada topológica de \mathbf{C}^{hom} respecto de la microescala (Giusti (2009)). Consideremos además una representación tipo *level set* del dominio, donde ambos subdominios Ω_μ^1 y Ω_μ^2 son caracterizados mediante la función $\psi \in L^2(\Omega_\mu)$ tal que:

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{y}) &< 0 \text{ si } \mathbf{y} \in \Omega_\mu^1; \\ \psi(\mathbf{y}) &> 0 \text{ si } \mathbf{y} \in \Omega_\mu^2. \end{aligned} \quad (22)$$

El algoritmo propone como punto de partida una topología inicial ψ_0 . Luego define una secuencia $(\psi_i)_{i \in N}$ de funciones *level set* (que se corresponden con sucesivas topologías del RVE) hasta cumplir la condición de convergencia.

Es importante resaltar que el criterio de actualización de la topología ψ propuesto por Ams-tutz et al. (2010) se ha modificado para tener en cuenta que el gradiente de la función objetivo tiende a cero en puntos cercanos al óptimo. Otro punto clave para el éxito del algoritmo es una selección adecuada de la configuración inicial $\psi_0(\mathbf{x})$ de la función *level set* para inicializar el algoritmo.

5. SIMULACIONES NUMÉRICAS

En las secciones previas se detallaron las formulaciones de resolución de problemas de optimización. El método a aplicar en la macroescala (FMO) obtiene una distribución óptima del campo \mathbf{C}^e (con $e = 1, \dots, n_{elem}$). Como post-proceso se determina la clase de simetría a la que corresponde cada \mathbf{C}^e y los mismos son reorientados en dirección a su eje de simetría, obteniendo el tensor \mathbf{C}^{e*} para cada elemento finito del dominio. Por último, se diseña la microestructura de cada elemento e utilizando el algoritmo de Derivada Topológica. De esta manera se realiza

un ciclo completo de diseño del metamaterial, combinando Optimización Libre de Material y Derivada Topológica (FMO-TD) para la macroescala y microescala respectivamente.

5.1. Optimización libre de material (FMO)

En la Fig. (5) se esquematiza el problema mecánico macro a resolver. Consiste en una viga con forma de L invertida. Se encuentra empotrada en su base y se le impone una carga puntual en el extremo inferior derecho. Se utiliza la hipótesis de tensión plana.

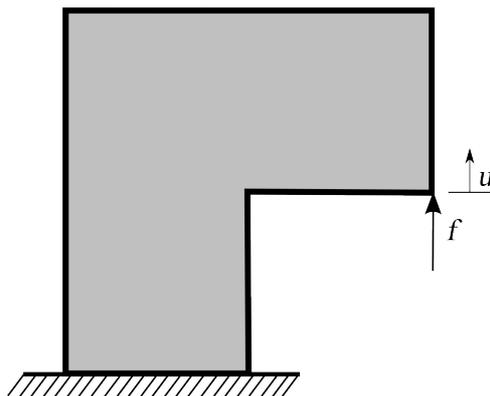


Figura 5: Dominio de diseño, condiciones de borde y cargas en el problema de viga L.

Con FMO se resolvieron dos casos:

- Caso A: Minimización de la traza, según la formulación dada en las Ecs. (8).
- Caso B: Minimización de la flexibilidad, según la formulación dada en las Ecs. (9).

Ambos problemas de optimización fueron resueltos con el mencionado algoritmo de punto interior FAIPA (Herskovits et al. (2005)). La solución inicial impuesta consiste en una distribución homogénea de material cuyo tensor elástico es

$$C_0^e = \begin{pmatrix} \frac{E}{1-\nu^2} & \frac{E\nu}{1-\nu^2} & 0 \\ \frac{E}{1-\nu^2} & \frac{E\nu}{1-\nu^2} & 0 \\ sym & & \frac{E}{2(1+\nu)} \end{pmatrix} \quad \forall \quad e = 1, \dots, n_{elem}; \quad (23)$$

con el módulo de Young $E = 1[kg/cm^2]$ y el módulo de Poisson $\nu = 0.3$. Las restricciones matriciales dadas en las Ecs.(8c) y (9c) se imponen al tensor $C(x)$ a través de tres desigualdades, una por cada *menor principal* de la matriz de elasticidad en notación de Voigt-Mandel. Siendo C_{jk}^e la componente jk del tensor elástico (en representación matricial) del elemento finito e , en la Ec. (24) se detalla el cálculo de los menores de cada matriz y la condición que debe cumplir cada uno.

$$mC_1^e = C_{1111}^e > 0 \quad (24a)$$

$$mC_2^e = C_{1111}^e \cdot C_{2222}^e - C_{1122}^e \cdot C_{2211}^e > 0 \quad (24b)$$

$$mC_3^e = \det(C^e) > 0 \quad (24c)$$

En las Ecs. (8d) y (9d), ρ_{max} toma el valor de la traza de un elemento evaluada en la iteración inicial, mientras que $\rho_{min} = \rho_{max}/10^3$. Al resolver el problema de minimización de la traza

(Caso A) en la restricción dada por la Ec. (8e), γ_{compl} toma el valor $\alpha(f^T u_0)$, siendo $(f^T u_0)$ la flexibilidad del dominio totalmente homogéneo, y α un factor tal que $0 < \alpha \leq 1$. Al trabajar sobre el problema de minimización de la flexibilidad (Caso B), para la cota superior de la integral de las trazas (Ec. (9e)), se adopta el valor medido en el punto inicial del problema $\gamma_{tr} = \alpha(\sum_{i=1}^{n_{elem}} tr(C^e))_0$, también multiplicado por α . Ambos problemas han sido discretizados con 2187 elementos finitos.

5.1.1. Resultados de la optimización en la macroescala

Caso A: Minimización de la integral de la traza La distribución de la traza obtenida para el caso de minimización del problema planteado en las Ecs. (8) se presenta en la Fig. (6). En este caso se adoptó $\alpha = 0.2$; que consiste en permitir a la solución una flexibilidad máxima de un 20 % de la flexibilidad inicial.

La función costo inicialmente vale $J_0^{tr} = 1.1295e03$ y alcanza un valor mínimo de $J_{fin}^{tr} = 223.36$ en la iteración final $it = 1218$. La flexibilidad se mantiene en su valor máximo permitido $f^T u = 3.0832e12[kg \cdot cm]$.



Figura 6: Distribución de la $tr(C(x))$ para el Caso A.

Caso B: Minimización de flexibilidad En la Fig. (7) se muestra la distribución de la traza que tiene como resultado la minimización de la flexibilidad del problema descrito en las Ecs. (9). El problema converge en 2485 iteraciones.

En este caso, la adopción de $\alpha = 0.2$ implica que la integral de la traza en la solución final no debe superar el 20 % del valor inicial de dicha integral. La función costo inicial es $J_0^f = 3.8427e12[kg \cdot cm]$ y se encuentra un mínimo $J_{fin}^f = 8.2867e11[kg \cdot cm]$ en la iteración 2485. La integral de la traza se ha mantenido en $\sum_{e=1}^{n_{elem}} tr(C^e) = 1.1295e03$.

Cabe destacar que en ambos casos de la optimización FMO (Casos A y B) se obtuvieron tensores constitutivos con componente C_{1122} negativa en algunos puntos en específicos del dominio. Esto implica que puntos con Módulo de Poisson negativo son más óptimos bajo ciertas condiciones de carga.

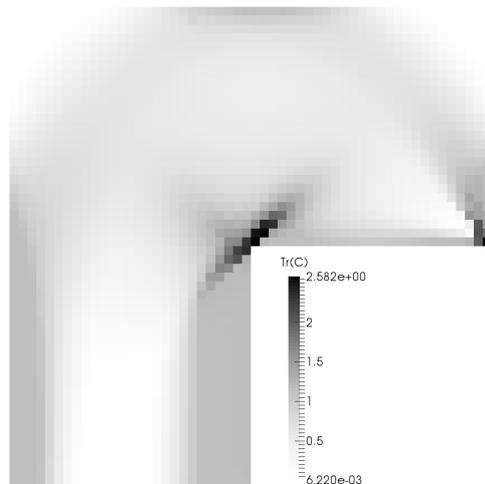


Figura 7: Distribución de la $tr(\mathbf{C}(x))$ para el Caso B.

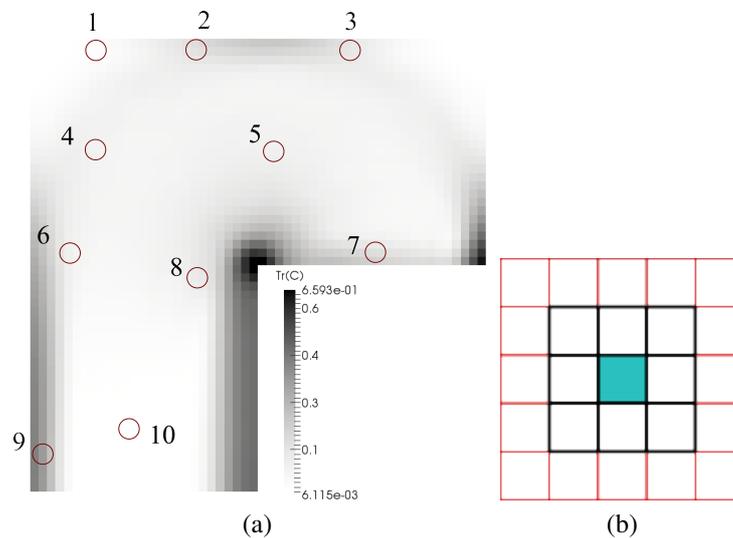


Figura 8: a) Celdas detalladas en las Tabs. (2), (3), (4) y (5), Caso A. b) Simplificación para el diseño de la microestructura.

5.2. Diseño topológico de la microestructura

Una vez obtenida la distribución óptima del tensor elástico \mathbf{C}^e en cada elemento finito, se realiza el diseño de su microestructura adoptando un dominio microestructural (RVE) cuadrado. Como preproceso a este diseño, se reorientan los tensores según lo expuesto en la Sec. (3.1).

Para el diseño de la microestructura, se toma una celda representativa por cada grupo de 3×3 elementos finitos. En la Fig. (8b) se expone un diagrama de esta simplificación, donde la celda coloreada es la que se adopta para el diseño. En las Tablas. (2), (3), (4) y (5) se visualizan 10 microceldas diseñadas, rotadas según el ángulo θ obtenido con el procedimiento explicado en la Sec.(3.1). La fase de material duro se grafica en color negro, y la fase de material blando en color blanco. También se detalla para cada microcelda el \mathbf{C}^{e*} requerido y el \mathbf{C}^{hom} logrado en cada caso. En la Fig (8a) se identifican, para el Caso A, los puntos de diseño de la macroescala mostrados.

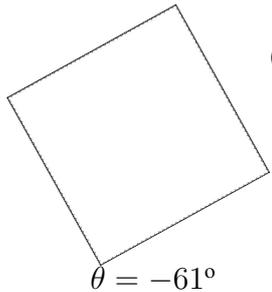
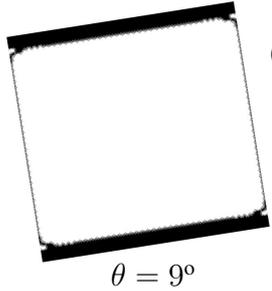
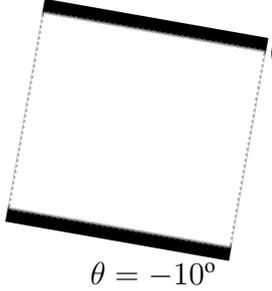
Diseño de microcelda	Tensores requerido C^{e*} y logrado C^{hom}
 <p>01</p> <p>$\theta = -61^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 1,6509e - 02 & 8,3427e - 04 & 0,0000e + 00 \\ & 1,6509e - 02 & 0,0000e + 00 \\ sym & & -6,9741e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 1,6515e - 02 & 7,0476e - 04 & 2,7168e - 17 \\ & 1,6515e - 02 & 1,9379e - 17 \\ sim & & 4,1031e - 04 \end{pmatrix}$
 <p>02</p> <p>$\theta = 9^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 1,4957e - 01 & 8,6707e - 03 & 0,0000e + 00 \\ & 4,8255e - 03 & 0,0000e + 00 \\ sim & & 1,4167e - 02 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 1,4968e - 01 & 1,5537e - 03 & -1,2836e - 14 \\ & 7,2546e - 03 & 1,2954e - 13 \\ sim & & 4,8443e - 04 \end{pmatrix}$
 <p>03</p> <p>$\theta = -10^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 1,3217e - 01 & 1,4429e - 03 & 0,0000e + 00 \\ & 1,4984e - 03 & 0,0000e + 00 \\ sim & & -1,0009e - 02 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 1,3214e - 01 & 6,8220e - 04 & 2,1654e - 16 \\ & 1,6883e - 03 & -5,1990e - 17 \\ sim & & 4,5615e - 04 \end{pmatrix}$

Tabla 2: Diseño de microceldas

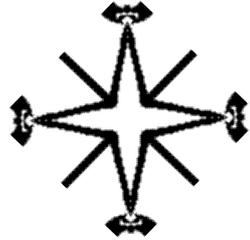
Diseño de microcelda	Tensores requerido C^{e*} y logrado C^{hom}
 <p style="text-align: center;">$\theta = 46^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 4,3468e - 02 & -1,3345e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & 4,3468e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & sym & -4,5585e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 4,3492e - 02 & -1,3195e - 02 & 6,9095e - 16 \\ & 4,3492e - 02 & 2,5352e - 15 \\ & sim & 2,5427e - 03 \end{pmatrix}$
 <p style="text-align: center;">$\theta = -5^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 4,6168e - 02 & -3,7416e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & 4,6168e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & sim. & -1,5078e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 4,7546e - 02 & -3,1992e - 02 & 4,0517e - 11 \\ & 4,7546e - 02 & 4,0283e - 11 \\ & sim. & 3,2527e - 03 \end{pmatrix}$
 <p style="text-align: center;">$\theta = -16^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 2,5719e - 02 & -1,8614e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & 2,5719e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & sim. & 5,5753e - 04 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 2,1697e - 02 & -7,9757e - 03 & -1,0343e - 10 \\ & 2,2577e - 02 & -9,1949e - 11 \\ & sim. & 1,2927e - 03 \end{pmatrix}$

Tabla 3: Diseño de microceldas

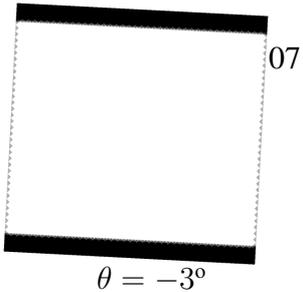
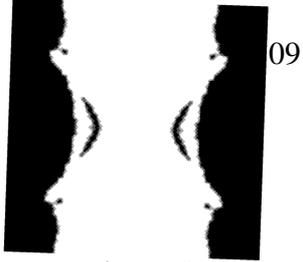
Diseño de microcelda	Tensores requerido C^{e*} y logrado C^{hom}
 <p style="text-align: right;">07</p> <p style="text-align: center;">$\theta = -3^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 1,6175e - 01 & 3,2791e - 03 & 0,0000e + 00 \\ & -4,5803e - 03 & 0,0000e + 00 \\ sim. & & -4,2269e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 1,6175e - 01 & 6,4694e - 04 & 4,5458e - 16 \\ & 1,5457e - 03 & 1,4213e - 18 \\ sim. & & 4,3198e - 04 \end{pmatrix}$
 <p style="text-align: right;">08</p> <p style="text-align: center;">$\theta = -12^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 7,5549e - 02 & -4,2910e - 02 & 0,0000e + 00 \\ & 7,5549619e - 02 & 0,0000e + 00 \\ sim. & & -1,9775e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 7,6228325e - 02 & -4,1112278e - 02 & -1,2727e - 11 \\ & 7,6228e - 02 & 1,2842e - 11 \\ sim. & & 5,0540e - 03 \end{pmatrix}$
 <p style="text-align: right;">09</p> <p style="text-align: center;">$\theta = -2^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 4,1751e - 01 & 7,2148e - 04 & 0,0000e + 00 \\ & -8,7550e - 03 & 0,0000e + 00 \\ sim. & & 2,1145e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 4,1752e - 01 & 1,0735e - 03 & 1,7961e - 13 \\ & 2,5962e - 03 & 1,0466e - 13 \\ sim. & & 7,9172e - 04 \end{pmatrix}$

Tabla 4: Diseño de microceldas

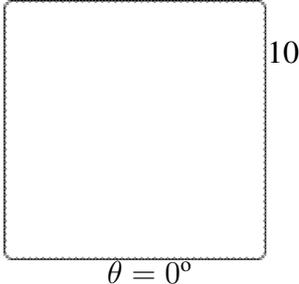
Diseño de microcelda	Tensores requerido C^{e*} y logrado C^{hom}
 <p style="text-align: center;">$\theta = 0^\circ$</p>	$C^{e*} = \begin{pmatrix} 5,9187e - 03 & 3,0713e - 03 & 0,0000e + 00 \\ & 5,9187e - 03 & 0,0000e + 00 \\ sim. & & 1,4236e - 03 \end{pmatrix}$ $C^{hom} = \begin{pmatrix} 5,9360e - 03 & 3,0497e - 03 & 7,2392e - 16 \\ & 5,9360e - 03 & 7,3593e - 16 \\ sim. & & 4,0556e - 04 \end{pmatrix}$

Tabla 5: Diseño de microceldas

5.3. Medición de la flexibilidad de la microestructura diseñada

El paso final del procedimiento consiste en medir la flexibilidad obtenida con las estructuras cuyo material ha sido diseñado con la metodología aquí expuesta, reinsertando en cada elemento finito el correspondiente C^{hom} logrado en la optimización topológica.

Como validación de la técnica se simuló ambos problemas (Caso A y Caso B) aplicando el algoritmo de diseño topológico "Modified SIMP" (Sigmund (2007)) con idénticas condiciones de borde, minimizando la flexibilidad y restringiendo el volumen a los valores obtenidos mediante FMO-TD. De esta manera se lograron resultados contrastables que se exponen en la Tabla (6). En la segunda y tercer fila se tienen la densidad y la flexibilidad, respectivamente, obtenidas aplicando FMO-TD. En la cuarta fila se detalla la flexibilidad correspondiente a la solución de Modified-SIMP con el volumen correspondiente.

	Caso A	Caso B
ρ	0.24	0.54
$f^T u$	3.08e11	8.28e11
$f^T u_{SIMP}$	2.82e11	9.14e11

Tabla 6: Resultados de flexibilidad y fracción de volumen.

6. CONCLUSIONES Y DISCUSIÓN

Contrastando ambos procedimientos de diseño (SIMP vs. FMO-TD), se obtuvieron valores iguales de flexibilidad para igual cantidad de densidad. Se intuye conceptualmente que FMO-TD debería ofrecer un resultado más óptimo que SIMP. Esto se debe a que el SIMP sólo da lugar a material homogéneo en los sectores del dominio donde la densidad es distinta de cero, mientras que FMO-TD ofrece una libertad mayor a las componentes del tensor elástico del material. Una razón por la cual se atribuye un resultado menos óptimo de lo esperado es que el diseño de toda la microestructura (usando Derivada Topológica) se realizó con celdas de forma cuadrada. Pensamos que esto condiciona la Optimización Topológica, ya que según lo

expuesto en Auffray y Ropars (2016), podríamos suponer que se puede realizar un mejor diseño de la microestructura si la forma de la microcelda refleja la clase de simetría del tensor C^* . Por ejemplo se podrían emplear celdas con forma de paralelogramo, rectangulares, cuadradas y hexagonales para las simetrías Z_2 , D_2 , D_4 , $O_{(2)}$, respectivamente. Esto corresponde a un siguiente paso del trabajo, esperando conseguir mejores valores de flexibilidad involucrando un menor volumen del material. Es excesiva la cantidad de iteraciones necesarias para que los problemas de FMO convergan, este es un punto a mejorar.

Un resultado a destacar es la presencia, en varias regiones de la estructura, donde se requiere un material con Poisson negativo. Esto puede convertirse en otra ventaja sobre SIMP, ya que se puede concluir que puntos materiales con tensores con $C_{1122} < 0$ se comportan de manera más óptima.

AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecen el soporte financiero de CONICET y ANPCyT (proyectos PIP 2013-2015 631 y PICT 2014-3372) y del *European Research Council* bajo el programa *European Unions Seventh Framework Programme (FP/2007-2013) / ERC* Convenio N. 320815 (*ERC Advanced Grant Project Advanced tools for computational design of engineering materials COMP-DES-MAT*).

REFERENCIAS

- Amstutz S., Giusti S., Novotny A., y de Souza Neto E. Topological derivative for multi-scale linear elasticity models applied to the synthesis of microstructures. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 84(6):733–756, 2010.
- Auffray N. y Ropars P. Invariant-based reconstruction of bidimensional elasticity tensors. *International Journal of Solids and Structures*, 87:183–193, 2016.
- Ben-Tal A., Kočvara M., Nemirovski A., y Zowe J. Free material design via semidefinite programming: The multiload case with contact conditions. *SIAM review*, 42(4):695–715, 2000.
- Bendsoe M., Guedes J., Haber R.B., Pedersen P., y Taylor J. An analytical model to predict optimal material properties in the context of optimal structural design. *Journal of Applied Mechanics*, 61(4):930–937, 1994.
- Forte S. y Vianello M. A unified approach to invariants of plane elasticity tensors. *Meccanica*, 49(9):2001–2012, 2014.
- Giusti S.M. *Análise de sensibilidade topológica em modelos constitutivos multi-escalas*. Tesis de Doctorado, PhD thesis, LNCC, Laboratório Nacional de Computação Científica, Petrópolis, RJ, Brasil, 2009.
- He Q.C. y Zheng Q.S. On the symmetries of 2d elastic and hyperelastic tensors. *Journal of elasticity*, 43(3):203–225, 1996.
- Herskovits J., Mappa P., Goulart E., y Soares C.M. Mathematical programming models and algorithms for engineering design optimization. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(30):3244–3268, 2005.
- Kočvara M. y Stingl M. Free material optimization for stress constraints. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 33(4-5):323–335, 2007.
- Kočvara M. y Stingl M. Solving stress constrained problems in topology and material optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 46(1):1–15, 2012.
- Sigmund O. Morphology-based black and white filters for topology optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 33(4-5):401–424, 2007.

- Vianello M. An integrity basis for plane elasticity tensors. *Archives of Mechanics*, 49(1):197–208, 1997.
- Zheng X., Lee H., Weisgraber T.H., Shusteff M., DeOtte J., Duoss E.B., Kuntz J.D., Biener M.M., Ge Q., Jackson J.A., et al. Ultralight, ultrastiff mechanical metamaterials. *Science*, 344(6190):1373–1377, 2014.
- Zowe J., Kočvara M., y Bendsøe M.P. Free material optimization via mathematical programming. *Mathematical programming*, 79(1-3):445–466, 1997.