

DISEÑO DE METAMATERIALES PARA MANIPULACIÓN DEL FLUJO DE CALOR COMO SOLUCIÓN DE UN PROBLEMA DE OPTIMIZACIÓN

Ignacio Peralta, Ángel A. Ciarbonetti, Alejandro E. Albanesi y Víctor D. Fachinotti*

*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,
e-mail: vfachino@intec.unl.edu.ar

Palabras Clave: Diseño de metamateriales, manipulación del flujo de calor, bloqueo del flujo de calor, camuflaje térmico, optimización.

Resumen. Para manipular el flujo de calor a fin de que satisfaga una tarea preestablecida en un dominio dado, es necesario usar materiales de diseño ("metamateriales") con una distribución apropiada de conductividad térmica anisótropa en ese dominio. En este trabajo, se propone un nuevo método para diseñar el metamaterial para un dispositivo destinado a realizar una tarea dada. El diseño se consigue como solución de un problema de optimización en el que la función a minimizar es el error en el cumplimiento de la tarea y las variables de diseño definen la variación de la microestructura en el dispositivo. Esta es una alternativa más general que el enfoque basado en la termodinámica de transformación usado por otros autores para el diseño de dispositivos manipuladores de flujo térmico, que sólo admite casos específicos de manipulación en dominios de geometría y condiciones de borde sencillas. Introducimos la anisotropía en la conductividad térmica mediante el uso de materiales compuestos de dos láminas de conductividad dispar. El espesor de las láminas y su orientación punto a punto del dispositivo constituyen las variables de diseño del problema de optimización. Como ejemplo de aplicación, diseñamos un dispositivo que, inserto en una región sujeta a flujo de calor, bloquee el flujo en la región que encierra y, a la vez, mantenga el flujo inalterado fuera de él (efecto conocido como camuflaje térmico).

1. INTRODUCCIÓN

Recientemente, se han logrado innovaciones mayores en electrónica y comunicaciones manipulando el flujo electromagnético (Maldovan, 2013). Aprovechando la analogía entre electromagnetismo y termodinámica en estado estacionario, aparecieron materiales con propiedades térmicas efectivas extremas (los “metamateriales” térmicos), difíciles o imposibles de obtener en materiales existentes, como por ejemplo el metamaterial para invertir el flujo térmico propuesto por Narayana y Sato (2012), inspirado en el que propusieron Chen y Chan (2007) para rotar campos electromagnéticos.

En comparación con el avance en control de flujo en electromagnetismo, la manipulación del flujo de calor está en su fase inicial. Hasta el momento, el diseño de metamateriales ha tenido base empírica (como en el bloqueador de flujo de Narayana y Sato (2012)), o bien se ha basado en el concepto de termodinámica de transformación (como en el inversor y el concentrador de flujo de Narayana y Sato (2012) o el camuflador de flujo de Schittny et al. (2013)), tomado prestado del campo del electromagnetismo (Pendry et al., 2006).

Tales enfoques de diseño tienen limitaciones para problemas más generales en cuanto a la magnitud y dirección del flujo deseado, a la geometría del dispositivo manipulador del flujo o del dominio en el que está embebido, o a las condiciones de flujo o temperatura impuestas en el borde de ese dominio. Para problemas generales, proponemos un nuevo enfoque basado en optimización, en que la función objetivo es la medida en que el flujo se acerca en magnitud y dirección a lo deseado, y las variables de diseño caracterizan la distribución espacial del metamaterial dentro del dispositivo manipulador.

Presentamos este nuevo método aplicado a un ejemplo de camuflaje-bloqueo térmico similar al desarrollado por Schittny et al. (2013).

2. CONDUCCIÓN DE CALOR EN FUNCIÓN DE LA MICROESTRUCTURA

Consideremos el dominio Ω de la Figura 1, con frontera $\partial\Omega$ dividida en dos partes no solapadas: $\partial\Omega_q$ (con flujo de calor q_{pared} impuesto) y $\partial\Omega_T$ (con temperatura T_{pared} impuesta). En régimen estacionario, la conducción de calor en Ω obedece a la ecuación:

$$-\text{div}(\mathbf{k} \text{grad } T) + s = 0 \quad \text{en } \Omega, \quad (1)$$

sujeta a las condiciones de borde:

$$T = T_{\text{pared}} \quad \text{en } \partial\Omega_T, \quad (2)$$

$$-\mathbf{k} \text{grad } T \cdot \mathbf{n} = q_{\text{pared}} \quad \text{en } \partial\Omega_q, \quad (3)$$

donde T es la temperatura, s es la fuente interna de calor, \mathbf{k} es la conductividad térmica efectiva y \mathbf{n} es la normal exterior a $\partial\Omega$.

Usando el método de elementos finitos (MEF), el campo de temperaturas en Ω es aproximado como

$$T(\mathbf{x}) = N_j(\mathbf{x})T_j \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (4)$$

donde N_j es la función de forma asociada al nodo j de la malla de elementos finitos (Ω discretizado) y T_j es la temperatura del nodo j (incógnita). Si aplicamos la formulación estándar (Galerkin) de MEF, la temperatura nodal T_j es la solución del sistema de ecuaciones algebraicas

$$K_{ij}T_j = F_i, \quad (5)$$

donde K_{ij} y F_i son las componentes de la matriz de conductividad global y del vector de flujos nodales, respectivamente, dados por

$$K_{ij} = \int_{\Omega} \text{grad } N_i \cdot \mathbf{k} \text{ grad } N_j \, dV, \tag{6}$$

$$F_i = \int_{\Omega} s N_i \, dV + \int_{\partial\Omega_q} q_{\text{pared}} N_i \, dS. \tag{7}$$

El sistema de ecuaciones (5) es la versión discretizada usando MEF estándar del problema de conducción de calor definido por la ecuación (1) sujeta a las condiciones de borde (2) y (3).

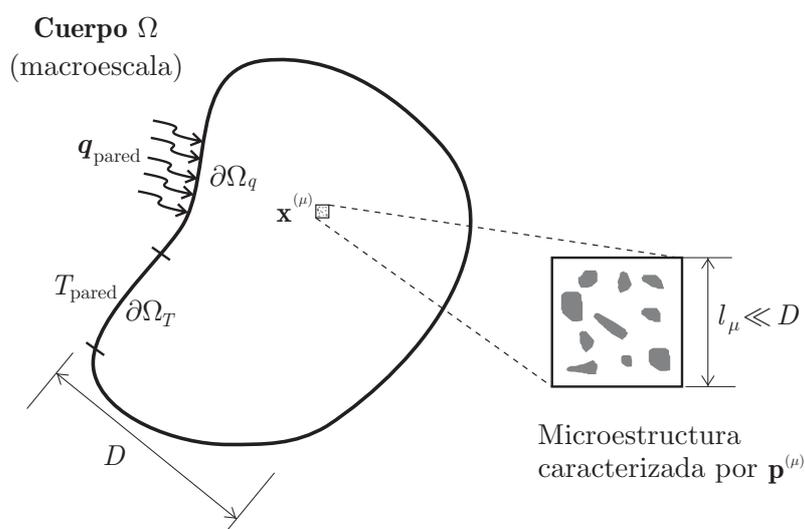


Figura 1. Problema térmico macroscópico.

Dejemos que Ω tenga una variación espacial de microestructura, relevada en una serie de puntos de muestreo $\mathbf{x}^{(\mu)} \in \Omega$ ($\mu = 1, \dots, N$). Y sea la microestructura en cualquier $\mathbf{x}^{(\mu)}$ definida por parámetros agrupados en el vector $\mathbf{p}^{(\mu)} = [p_1^{(\mu)}, \dots, p_n^{(\mu)}]$. Así, la conductividad efectiva \mathbf{k} en $\mathbf{x}^{(\mu)}$ es función de dichos parámetros, o sea:

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}^{(\mu)}) = \mathbf{k}(\mathbf{p}^{(\mu)}).$$

A su vez, la microestructura en todo Ω queda definida por el vector $\mathbf{P} = [\mathbf{p}^{(1)}, \dots, \mathbf{p}^{(N)}]$. Luego, la matriz de conductividad global \mathbf{K} dada por la ecuación (6) es función de \mathbf{P} , y por ende, también lo son la temperatura nodal T_j (solución de la ecuación (5)) y el campo de temperaturas T aproximado por MEF (ecuación (4)).

3. DISEÑO DE LA MICROESTRUCTURA PARA MANIPULAR EL FLUJO DE CALOR

Entendemos por diseñar la microestructura en Ω la definición de todos los parámetros del vector \mathbf{P} en busca de que Ω ofrezca la respuesta deseada. En este caso, se trata de manipular el flujo de calor dentro de Ω forzándolo a tomar valores prescritos $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}$ en una serie de puntos $\mathbf{x}^{(q)}$, $q = 1, \dots, Q$. El flujo de calor en el punto $\mathbf{x}^{(q)}$ está dado por

$$\tilde{\mathbf{q}}(\mathbf{x}^{(q)}) = [-\mathbf{k} \text{ grad } T]_{\mathbf{x}^{(q)}} = -\mathbf{k}(\mathbf{p}^{(q)}) [\text{grad } N_j]_{\mathbf{x}^{(q)}} T_j(\mathbf{P}) \equiv \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P})$$

Luego, se trata de encontrar \mathbf{P} tal que

$$\mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) = \bar{\mathbf{q}}^{(q)}, \quad \text{para } q = 1, \dots, Q. \quad (8)$$

Supongamos que la búsqueda de \mathbf{P} esté restringida a un espacio admisible \mathcal{P} . Como generalmente no se puede cumplir exactamente la tarea (8) para $\mathbf{P} \in \mathcal{P}$, hagámoslo de la mejor manera posible resolviendo el siguiente problema de optimización no lineal con restricciones

$$\min_{\mathbf{P} \in \mathcal{P}} \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q \|\mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) - \bar{\mathbf{q}}^{(q)}\|^2, \quad (9)$$

o sea, minimizando el error cuadrático medio en la consecución de la tarea (8).

4. APLICACIÓN AL BLOQUEO Y CAMUFLAJE DEL FLUJO DE CALOR

Apliquemos la metodología propuesta al diseño de un dispositivo para bloquear y camuflar el flujo de calor como alternativa al que diseñaran Schittny et al. (2013) basados en el concepto de termodinámica de transformación. Embebiendo tal dispositivo en una placa sujeta a un flujo de calor impuesto, se quiere bloquear el flujo de calor en la parte de la placa encerrada por el dispositivo, y alterar mínimamente el flujo fuera del mismo (esto es camuflaje térmico).

El dominio Ω comprende la placa entera, un rectángulo de lados $W = 18$ cm y $H = 12$ cm, sujeto a las siguientes condiciones de borde: $T = T_{\max} = 80^\circ\text{C}$ en $x = -W/2$, $T = T_{\min} = 25^\circ\text{C}$ en $x = W/2$, $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ en $y = \pm H/2$ (ver Figura 2). Se desprecia el flujo de calor en la dirección normal a la placa. El material de la placa es homogéneo e isótropo con conductividad $k_0 = 85$ W/mK. Sin el dispositivo, el flujo de calor en la placa es

$$\mathbf{q}_0 = \begin{bmatrix} k_0(T_{\max} - T_{\min})/W \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26,0 \text{ kW/m}^2 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

El dispositivo a diseñar es el anillo $\Omega_{\text{libre}} \subset \Omega$ de radio interior $r = 2,5$ cm y exterior $R = 5$ cm, ver Figura 2. El anillo encierra la región Ω_{fijint} donde se desea bloquear el flujo. El material en Ω_{fijint} es cobre, con conductividad isótropa $k_{\text{cobre}} = 394$ W/mK.

El dominio Ω es discretizado usando una malla de 75×50 elementos finitos rectangulares bilineales, como muestra la Figura 3. Cada elemento azul, perteneciente al dispositivo Ω_{libre} , cuenta con un punto de muestreo de microestructura. En los demás elementos, el material está preestablecido. Además, en los elementos rojos hay flujo prescrito, como se explicará en la Sección 4.2.

4.1. Caracterización del metamaterial

Este problema de bloqueo-camuflaje es similar al planteado por Schittny et al. (2013). Ellos consiguieron manipular el flujo de calor en una placa de cobre practicándole perforaciones que se rellenaron con polidimetilsiloxano (PDMS), como se ve en la Figura 4. Ambos materiales tienen conductividades térmicas isótropas sensiblemente diferentes: $k_{\text{cobre}} = 394$ W/mK y $k_{\text{PDMS}} = 0,15$ W/mK. Variando la distribución de las perforaciones en densidad y forma, se logró la distribución de conductividad efectiva anisótropa que permitió manipular el flujo de calor de la manera deseada.

En este trabajo, siguiendo a Narayana y Sato (2012), introducimos la anisotropía en la conductividad efectiva usando un material compuesto de láminas de materiales A y B. Para que la

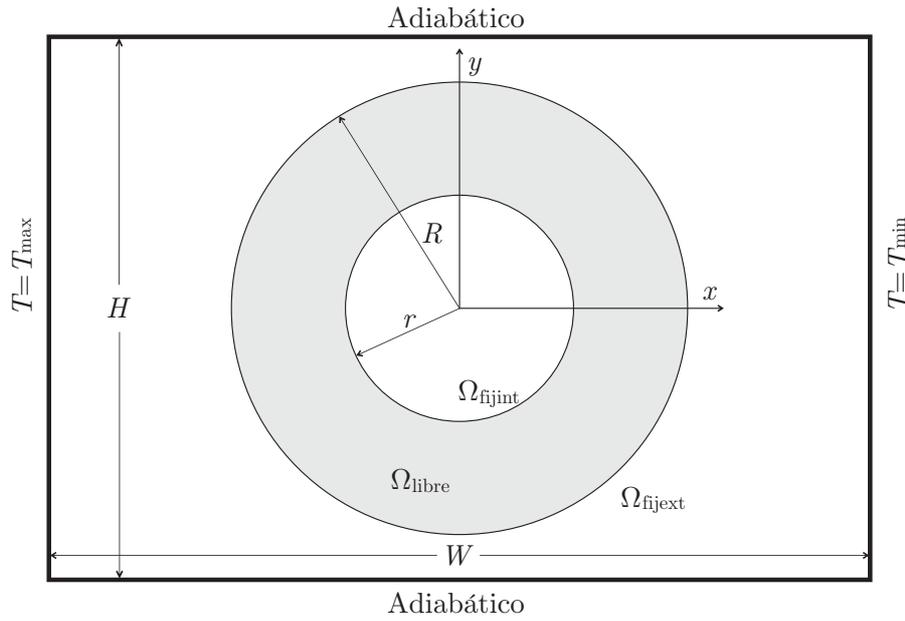


Figura 2. Problema de guiado de flujo: Dominio de análisis.

anisotropía sea marcada, los materiales A y B deben poseer conductividades k_A y k_B de magnitud muy dispar; como Schittny et al. (2013), adoptamos A=cobre y B=PDMS. Como muestra la Figura 3(b), el volumen elemental representativo (VER) de la microestructura de este laminado en el punto $\mathbf{x}^{(\mu)} \in \Omega_{\text{libre}}$ es caracterizado por el vector $\mathbf{p}^{(\mu)}$ de componentes $p_1^{(\mu)} = d_A^{(\mu)}$ (espesor de la capa del material A) y $p_2^{(\mu)} = \theta^{(\mu)}$ (orientación de las láminas); considerando un VER de espesor unitario, el espesor del otro material resulta $d_B = 1 - d_A$. La matriz de componentes del tensor de conductividad térmica efectiva en $\mathbf{x}^{(\mu)}$ respecto de la base ortonormal λ - τ (con λ longitudinal y τ transversal al laminado) resulta:

$$\mathbf{k}'(\mathbf{x}^{(\mu)}) = \begin{bmatrix} \frac{d_A^{(\mu)} k_A + d_B^{(\mu)} k_B}{l_\mu} & 0 \\ 0 & \frac{l_\mu}{d_A^{(\mu)} / k_A + d_B^{(\mu)} / k_B} \end{bmatrix} = \mathbf{k}'(d_A^{(\mu)}).$$

Referida a la base Cartesiana x - y , la matriz de conductividad efectiva está dada por

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}^{(\mu)}) = [\mathbf{R}(\theta^{(\mu)})]^T \mathbf{k}'(d_A^{(\mu)}) \mathbf{R}(\theta^{(\mu)}) = \mathbf{k}(d_A^{(\mu)}, \theta^{(\mu)}) = \mathbf{k}(\mathbf{p}^{(\mu)}), \tag{10}$$

donde \mathbf{R} es la matriz de rotación

$$\mathbf{R}(\theta) = \begin{bmatrix} \cos \theta & \text{sen } \theta \\ -\text{sen } \theta & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

La ecuación (10) es la que define explícitamente la conductividad efectiva en un punto en función de la microestructura en ese punto.

4.2. La tarea de bloqueo-camuflaje como problema de optimización

Queremos diseñar un dispositivo que bloquee el flujo de calor en Ω_{fijint} sin alterarlo en Ω_{fijext} , tarea que trataremos de cumplir resolviendo el problema de optimización

$$\min_{\mathbf{P}} \frac{1}{Q} \sum_q \|\mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) - \bar{\mathbf{q}}^{(q)}\|^2, \tag{11}$$

a) Dominio discretizado

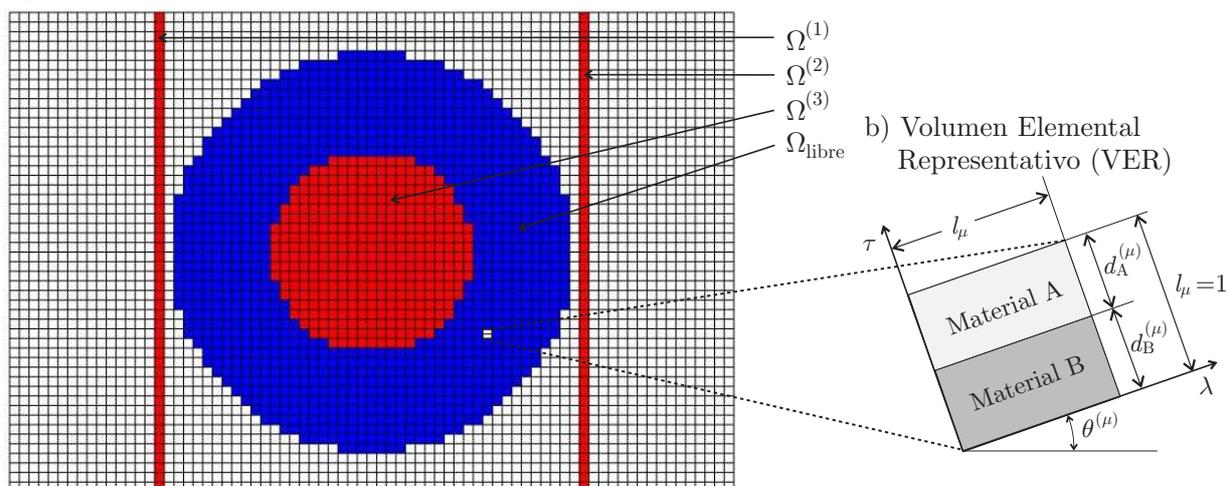


Figura 3. (a) Malla de elementos finitos del dominio Ω ; los elementos azules pertenecen al dispositivo a diseñar, y los elementos rojos tienen flujo de calor prescrito. (b) Volumen elemental representativo de la microestructura en un elemento del dispositivo.



Figura 4. Placa de cobre perforada del experimento de [Schittny et al. \(2013\)](#).

donde la sumatoria se extiende a todos los elementos de los dominios $\Omega^{(1)} \subset \Omega_{\text{fijext}}$, $\Omega^{(2)} \subset \Omega_{\text{fijext}}$ y Ω_{fijint} (elementos rojos en la Figura 3), cuyo número total es $Q = 444$; $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ en los centros de los elementos en $\Omega^{(1)}$ y $\Omega^{(2)}$, y $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{0}$ en los centros de los elementos en Ω_{fijint} .

El vector de variables de diseño \mathbf{P} es el conjunto de vectores $\mathbf{p}^{(\mu)}$ que caracterizan la microestructura de los $N = 1014$ elementos de Ω_{libre} (el dispositivo), con $P_{2\mu-1} = p_1^{(\mu)} = d_A^{(\mu)}$ y $P_{2\mu} = p_2^{(\mu)} = \theta^{(\mu)}$, $\mu = 1, 2, \dots, N$. Debido al material elegido, el problema (11) está sujeto a las siguientes restricciones de caja:

$$\begin{aligned} 0 \leq P_{2\mu-1} = d_A^{(\mu)} \leq 1, \\ 0 \leq P_{2\mu} = \theta^{(\mu)} \leq \pi, \quad \text{con } \mu = 1, \dots, N. \end{aligned}$$

Resolvemos este problema no lineal de optimización con restricciones usando el algoritmo de punto interior conocido como IPOPT ([Wächter y Biegler, 2006](#)). Para evitar inestabilidades tipo damero (“checkerboard”) en la solución óptima, recurrimos a la técnica de filtrado de densidad propuesta por [Sigmund \(2007\)](#).

4.3. Resultados

Las soluciones óptimas para d_A (la fracción de cobre, dado que el VER es unitario), d_B (la fracción de PDMS) y θ (la orientación de las láminas) en el dispositivo se plotean en la Figura 5. Se ve que la fracción de cobre aumenta radialmente en todo el anillo. Este aumento radial también aparece en la solución de Schittny et al. (2013) (Figura 4), aunque de forma concéntrica.

La Figura 6 muestra el campo de conductividad térmica efectiva, generalmente anisótropa, resultante de tal distribución de microestructura.

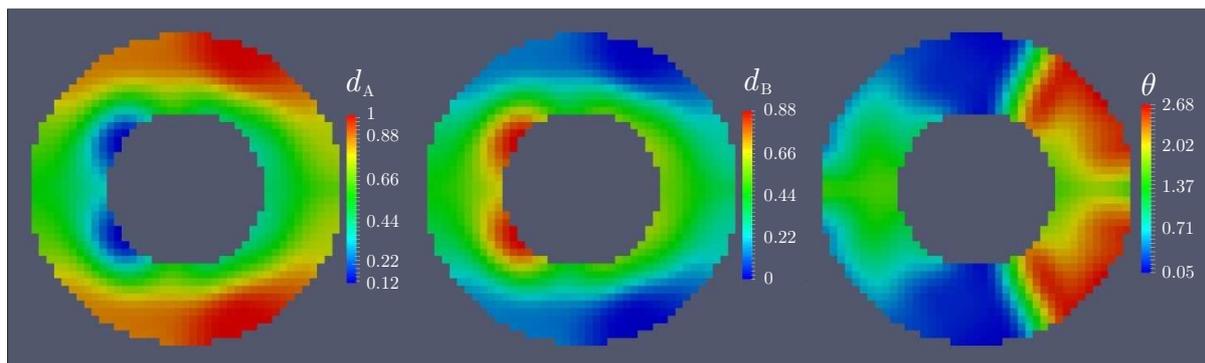


Figura 5. Variación de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PDMS (d_B) y de orientación de las láminas de cobre y PDMS en el dispositivo bloqueador-camuflador de flujo de calor.

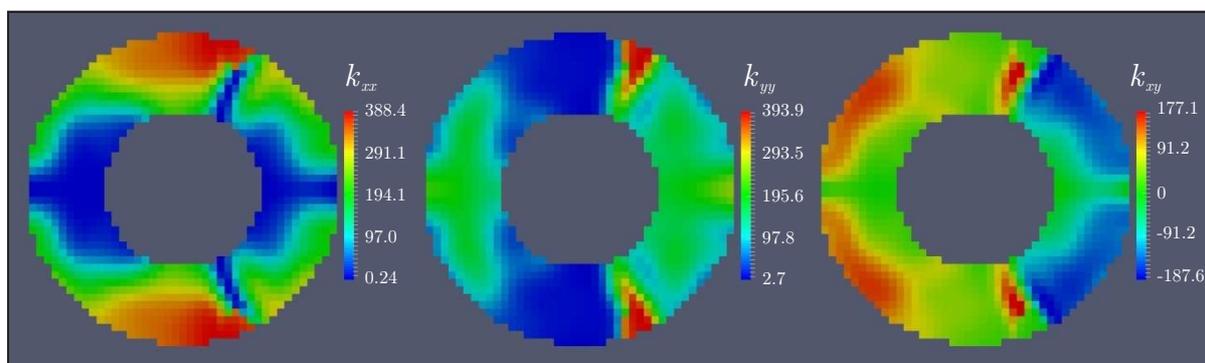


Figura 6. Componentes de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo, en W/mK.

Gracias a la distribución de conductividad de la Figura 6, se obtiene el campo de temperaturas de la Figura 7. Allí se puede verificar cualitativamente cuán bien se ha cumplido la tarea de camuflaje (las isotermas son mayormente verticales y equiespaciadas en el exterior del dispositivo) y de bloqueo en el interior del dispositivo (donde la diferencia de temperaturas no supera 1°C). Cuantitativamente, la raíz del error cuadrático medio en el cumplimiento de la tarea de bloqueo-camuflaje es $69,5 \text{ W/m}^2 = 2,7 \times 10^{-3} \|\mathbf{q}_0\|$, lo que consideramos altamente satisfactorio.

5. CONCLUSIONES

Se presentó un método novedoso para diseñar metamateriales para controlar el flujo de calor difusivo de formas impensadas si se usaran materiales ordinarios. El método consiste en resolver un problema de optimización en el que la función objetivo es el error en el cumplimiento de una

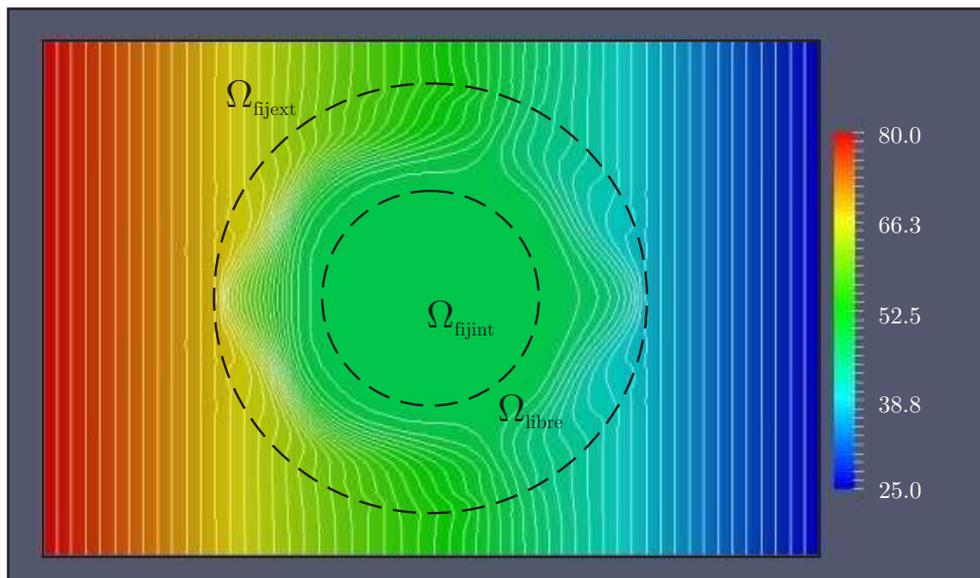


Figura 7. Distribución de temperaturas en la placa, en °C. La diferencia entre isotermas es de 1°C.

cierta tarea y las variables de diseño definen la microestructura del dispositivo para realizar esa tarea. Su potencialidad es demostrada por medio de una aplicación al diseño de un dispositivo bloqueador-camuflador del flujo de calor, lográndose que cumpla su tarea con gran precisión.

Tal solución puede ser útil en la protección contra el calentamiento excesivo de circuitos eléctricos o de microchips. Este y otros problemas reales serán el objeto de estudio en la continuación de este trabajo.

AGRADECIMIENTOS

Agradecemos a las siguientes instituciones por apoyar el presente trabajo:

- European Research Council (ERC), a través del proyecto “Advanced tools for computational design of engineering materials (COMP-DES-MAT)” (FP/2007-2013, ERC Grant Agreement 320815).
- Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Argentina, mediante el Proyecto PIP 1105 “Simulación Computacional de Problemas en Multifísica. Aplicación a Solidificación de Metales y Dispositivos Microelectromecánicos”.

REFERENCIAS

- Chen H. y Chan C.T. Transformation media that rotate electromagnetic fields. *Appl. Phys. Lett.*, 90:241105, 2007.
- Maldovan M. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature*, 503:209–217, 2013.
- Narayana S. y Sato Y. Heat flux manipulation with engineered thermal materials. *Phys. Rev. Lett.*, 108(21):214303, 2012.
- Pendry J.B., Schurig D., y Smith D.R. Controlling electromagnetic fields. *Science*, 312(5781):1780–1782, 2006.
- Schittny R., Kadic M., Guenneau S., y Wegener M. Experiments on transformation thermodynamics: Molding the flow of heat. *Phys. Rev. Lett.*, 110(19):195901, 2013.

- Sigmund O. Morphology-based black and white filters for topology optimization. *Struct. Multidisc. Optim.*, 33:401–424, 2007.
- Wächter A. y Biegler L.T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Program., Ser. A*, 106:25–57, 2006.