

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



Diseño computacional de materiales con aplicaciones térmicas y mecánicas

Ignacio Peralta

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA
Y CIENCIAS HÍDRICAS

INTEC

INSTITUTO DE DESARROLLO TECNOLÓGICO
PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN
DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

sinc(i)

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN SEÑALES,
SISTEMAS E INTELIGENCIA COMPUTACIONAL

Tesis de Doctorado 2019



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

Diseño computacional de materiales con aplicaciones térmicas y mecánicas

Ignacio Peralta

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado
como parte de los requisitos para la obtención

del grado de

DOCTOR EN INGENIERÍA

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

2019

Secretaría de Posgrado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Ciudad Universitaria,
Paraje "El Pozo", S3000, Santa Fe, Argentina.



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigación en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

Diseño computacional de materiales con aplicaciones térmicas y mecánicas

Ignacio Peralta

Lugar de trabajo:

CIMEC

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Universidad Nacional del Litoral

Director:

Víctor D. Fachinotti CIMEC

Co-director:

Pablo J. Sánchez CIMEC

Jurado Evaluador:

Dr. Adrián Cisilino

Dr. Sebastián Giusti

Dr. Javier Mroginski

Dr. Diego Cafaro

Universidad Nacional de Mar del Plata

Universidad Tecnológica Nacional

Universidad Nacional del Nordeste

Universidad Nacional del Litoral

2019



ACTA DE EVALUACIÓN DE TESIS DE DOCTORADO

En la sede de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la Universidad Nacional del Litoral, a los veinte días del mes de diciembre del año dos mil diecinueve, se reúnen los miembros del Jurado designado para la evaluación de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Diseño computacional de materiales con aplicaciones térmicas y mecánicas”*, desarrollada por el Ing. Ignacio PERALTA, DNI N° 34.827.831. Ellos son: Dr. Adrián Cisilino, Dr. Sebastián Giusti, Dr. Javier Mroginski y Dr. Diego Cafaro.

Luego de escuchar la Defensa Pública y de evaluar la Tesis, el Jurado resuelve:

El tema de tesis es de interés científico y tecnológico, identifica en forma precisa sus motivaciones, antecedentes, objetivos, alcance e hipótesis. Las conclusiones están debidamente fundamentadas en los resultados. La presentación oral fue muy clara y ordenada, mostrando solvencia en las respuestas y comentarios realizados. Por unanimidad se otorga la calificación Sobresaliente (10).

Sin más, se da por finalizado el Acto Académico con la firma de los miembros del Jurado al pie de la presente.

[Signature]
Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARÍO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas
Dr. Adrián Cisilino (*)

[Signature]
Dr. Sebastián Giusti
[Signature]
Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARÍO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas
Dr. Diego Cafaro (*)

[Signature]
Dr. Javier Mroginski

() Los Doctores Adrián Cisilino y Diego Cafaro participaron por videoconferencia*

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional N° 168 - Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

[Signature]
Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARÍO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas



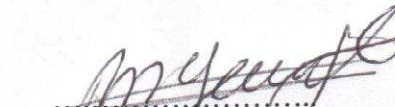
UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas


Santa Fe, 20 de Diciembre de 2019.

Como miembros del Jurado Evaluador de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Diseño computacional de materiales con aplicaciones térmicas y mecánicas”*, desarrollada por el Ing. Ignacio PERALTA, en el marco de la Mención “Mecánica Computacional”, certificamos que hemos evaluado la Tesis y recomendamos que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.

La aprobación final de esta disertación estará condicionada a la presentación de dos copias encuadernadas de la versión final de la Tesis ante el Comité Académico del Doctorado en Ingeniería.


Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas
Dr. Adrián Cisilino

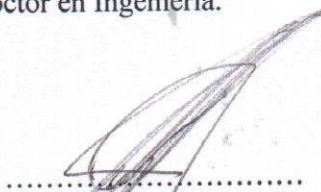

Dr. Sebastián Giusti


Dr. Javier Mroginski


Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas
Dr. Diego Cafaro

Santa Fe, 20 de Diciembre de 2019

Certifico haber leído la Tesis, preparada bajo mi dirección en el marco de la Mención “Mecánica Computacional” y recomiendo que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.


Dr. Pablo Sánchez
Codirector de Tesis


Dr. Víctor Fachinotti
Director de Tesis

Los Doctores Adrián Cisilino y Diego Cafaro participaron por videoconferencia

Universidad Nacional del Litoral
Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas
Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria
C.C. 217
Ruta Nacional Nº 168 - Km. 472,4
(3000) Santa Fe
Tel: (54) (0342) 4575 229
Fax: (54) (0342) 4575 224
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

Dr. JOSÉ LUIS MACOR
SECRETARIO DE POSGRADO
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas

Declaración legal del autor

Esta Tesis ha sido remitida a la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Universidad Nacional del Litoral, como parte de los requisitos para la obtención del grado de Doctor en Ingeniería.

Citaciones breves de esta disertación son permitidas sin la necesidad de un permiso especial, en la suposición de que la fuente sea correctamente citada. Solicitudes de permiso para una citación extendida o para la reproducción de este manuscrito en un todo o en parte serán exigidas por el portador legal del derecho de propiedad intelectual de la misma.

Ignacio Peralta

Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a mi madre y padre, que siempre hicieron lo imposible para que pudiera dedicarme a mis estudios, a mi hermano que me apoyó siempre, y a mi abuela Etelda, que es como una segunda madre. Quiero agradecer también a mis amigos y amigas del CIMEC, en especial a los de la oficina 47, que me acompañaron y ayudaron todos estos años. A mi director Víctor, que me guió durante el doctorado, y a mi amigo Alejandro, quien fuera el responsable de que me iniciara en el fascinante mundo de la investigación. Por último, y no menor, al Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), que financió mi investigación, y a las argentinas y argentinos que día a día trabajan para que la educación en la Argentina sea pública y gratuita.

Resumen

En esta Tesis se desarrollan, adaptan y aplican herramientas computacionales para el diseño de materiales avanzados interviniendo sobre la microestructura a fin de alcanzar respuestas macroscópicas controladas a solicitaciones de origen térmico y mecánico (eventualmente acopladas). Estos materiales de diseño o “metamateriales” exhiben propiedades extraordinarias, especialmente favorables para aplicaciones ingenieriles específicas. Dichas herramientas permiten optimizar la respuesta macroscópica del material, o de la pieza fabricada con este. Se plantea así un problema de optimización no lineal con restricciones en donde la función objetivo a minimizar es el error en el cumplimiento de esa respuesta macroscópica, y las variables de diseño definen la distribución de microestructura dentro del dominio de análisis. Se trabaja con materiales cuantitativamente caracterizables, cuyas propiedades físicas pueden controlarse, en magnitud y anisotropía, variando los parámetros que definen la microestructura del material. Se obtiene así una herramienta computacional de diseño general de materiales, particularmente aplicada al diseño de metamateriales, tanto para aplicaciones térmicas y mecánicas, como termo-mecánicas, y como una alternativa a la clásica metodología de diseño de metamateriales basada en transformación de coordenadas o mapeo conforme. Se tiene en cuenta también la fabricabilidad de los metamateriales diseñados, como así también propiedades termo-dependientes. Se aplican los conceptos de Optimización Discreta de Material y de Material Isotrópico Sólido con Penalización para introducir simplificaciones y obtener diseños de más fácil fabricación. Respecto al diseño de metamateriales térmicos, se diseñan diferentes dispositivos para manipular el flujo de calor, como ser, concentrador de calor, camuflador y bloqueador térmico, e inversor de flujo térmico, y se analizan tanto ejemplos en régimen estacionario como en régimen transitorio. Además, se describe la importancia del diseño de metamateriales considerando el régimen transitorio antes de alcanzar el estado estacionario, y se muestra una validación experimental de uno de los dispositivos diseñados computacionalmente. Respecto al diseño de metamateriales mecánicos, se aplica la metodología propuesta al diseño de un dispositivo para camuflaje mecánico en régimen estático, y se resuelve la dificultad de materializar las propiedades resultantes de aplicar la metodología de transformación de coordenadas a la Elasticidad, impedimento principal para el desarrollo de metamateriales mecánicos fabricables.

Abstract

In this Thesis, computational tools are developed, adapted and applied for the design of advanced materials. By changing the microstructure of those materials, controlled macroscopic responses are obtained under thermal and mechanical (also coupled) solicitations. These design materials or “metamaterials” exhibit extraordinary properties, especially for specific engineering applications. Such tools allow the optimization of the macroscopic response of the material or the piece fabricated with it. By this way, a nonlinear constrained optimization problem is proposed, where the objective function to minimize is the error in the accomplishment of the macroscopic responses, and the design variables define the microstructure distribution in the domain of analysis. Quantitatively characterized materials are used, whose physical properties can be controlled at magnitude and anisotropy by varying the parameters that define the microstructure of the material. By this way, a general design computational tool is obtained, particularly applied for the design of metamaterials, with thermal, mechanical and thermo-mechanical applications, as an alternative of the classical design methodology of metamaterials, based on coordinate transformation or conformal mapping. Fabricability of the so-designed metamaterials is taken into account, and also thermo-dependent properties. To introduce simplifications in the fabrication, the concepts of Discrete Material Optimization and Solid Isotropic Material with Penalization are applied. Regarding the design of thermal metamaterials, different devices for heat flux manipulation are designed, such as heat flux concentrator, device for thermal cloaking and blocking, and heat flux inverter. These devices were tested under steady-state and transient regimes. Further, the importance of designing thermal metamaterials considering the transient regime is highlighted, and a device for heat flux inversion is experimentally tested. Regarding mechanical metamaterials, the proposed design methodology is applied for the design of an elastostatic cloaking device, and the difficulties in fabrication of coordinate-transformation-based mechanical metamaterials are overcome.

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Motivación	1
1.2. Diseño de metamateriales por transformación de coordenadas	2
1.3. Diseño computacional de materiales	3
1.3.1. Diseño de metamateriales basado en optimización	4
1.4. Objetivos	5
1.4.1. Objetivo general	5
1.4.2. Objetivos particulares	5
1.5. Estructura de la Tesis	6
2. Diseño de metamateriales por transformación de coordenadas	7
2.1. Metamateriales térmicos	8
2.1.1. Camuflaje térmico	10
2.1.2. Concentración de flujo térmico	14
3. Diseño computacional de metamateriales térmicos en régimen estacionario	21
3.1. Metamateriales térmicos	21
3.1.1. Conducción del calor en un cuerpo heterogéneo	22
3.1.2. Manipulación de flujo térmico como solución de un problema de optimización	24
3.1.3. Definición de metamaterial para conducción anisótropa del calor	25
3.2. Metadispositivos para manipulación de flujo de calor	26
3.2.1. Concentrador de flujo de calor y camuflaje térmico	26
3.2.2. Camuflaje y bloqueo térmico	34
3.2.3. Inversor de flujo de calor y camuflaje térmico	37
3.3. Fabricabilidad en el diseño de materiales térmicos	44
3.3.1. Optimización Discreta de Material (DMO)	45

3.3.2.	Concentrador de flujo de calor por DMO con camuflaje térmico	49
3.3.3.	Material Isotrópico Sólido con Penalización (SIMP)	52
3.3.4.	Inversor de flujo de calor por SIMP con camuflaje térmico	53
3.3.5.	Inversor de flujo de calor por SIMP sin camuflaje térmico	56
3.3.6.	Otras aplicaciones por SIMP	59
3.4.	Validación experimental	60
3.4.1.	Inversor de flujo térmico	60
4.	Diseño computacional de metamateriales mecánicos en régimen estático	65
4.1.	Metamateriales mecánicos	65
4.1.1.	Campo de desplazamientos en un cuerpo heterogéneo	66
4.1.2.	Manipulación del campo de desplazamientos como solución de un problema de optimización	68
4.1.3.	Definición de metamaterial para deformación plana	69
4.2.	Metadispositivos para manipulación del campo de desplazamientos	70
4.2.1.	Camuflaje mecánico	70
4.2.2.	Camuflaje termo-mecánico	74
4.3.	Fabricabilidad en el diseño de materiales mecánicos	79
4.3.1.	Optimización Discreta de Material (DMO)	80
4.3.2.	Camuflaje mecánico por DMO	81
5.	Diseño computacional de metamateriales térmicos en régimen transitorio	89
5.1.	Metamateriales térmicos	89
5.1.1.	Conducción del calor transitoria en un cuerpo heterogéneo	90
5.1.2.	Manipulación de flujo térmico como solución de un problema de optimización	92
5.1.3.	Definición de metamaterial para conducción anisótropa del calor	93
5.2.	Metadispositivos para manipulación de flujo de calor	93
5.2.1.	Bloqueo térmico	93
5.2.2.	Sobre la importancia del diseño de metadispositivos para régimen transitorio	99
5.2.3.	Camuflaje y bloqueo térmico	100
6.	Conclusiones	103
6.1.	Publicaciones en revistas científicas	106
6.1.1.	Publicaciones derivadas de la Tesis	106
6.1.2.	Publicaciones derivadas del Doctorado	106

6.2. Publicaciones y presentaciones en congresos durante el Doctorado	107
6.3. Líneas de investigación a futuro	108

Índice de figuras

2.1.	Concepto de camuflaje. La región blanca corresponde a la zona de invisibilidad. El ánulo gris oscuro representa el dispositivo camuflador.	10
2.2.	Camuflaje térmico utilizando el concepto de transformación de coordenadas. . . .	13
2.3.	(a) Conductividad térmica radial $\kappa'_{r'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (b) Conductividad térmica tangencial $\kappa'_{\theta'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (c) Capacidad calorífica $\rho'c'$ [$\text{MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$].	13
2.4.	Campo de temperatura (en $^{\circ}\text{C}$) e isothermas (cada 0.29°C) en el dominio de análisis para diferentes instantes de tiempo. (a) $t = 100$ s, (b) $t = 1000$ s, (c) $t = 10000$ s y (d) $t = 50000$ s.	15
2.5.	Camuflaje térmico utilizando el concepto de transformación de coordenadas. . . .	18
2.6.	(a) Conductividad térmica radial $\kappa'_{r'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (b) Conductividad térmica tangencial $\kappa'_{\theta'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (c) Capacidad calorífica $\rho'c'$ [$\text{MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$].	18
2.7.	Campo de temperatura (en $^{\circ}\text{C}$) e isothermas (cada 0.29°C) en el dominio de análisis para diferentes instantes de tiempo. (a) $t = 100$ s, (b) $t = 1000$ s, (c) $t = 10000$ s y (d) $t = 30000$ s.	19
3.1.	Problema de manipulación de flujo de calor en el dominio Ω , donde las propiedades efectivas en cada sub-dominio $\Omega^{(e)}$ dependen de un grupo de parámetros $\mathbf{p}^{(e)}$	22
3.2.	Dominio de análisis para el problema de concentración y camuflaje térmico. . . .	27
3.3.	(a) Malla de elementos finitos del dominio de análisis Ω ; los elementos azules pertenecen al dispositivo, y los rojos poseen flujo de calor prescrito. (b) Elemento de Volumen Representativo (RVE) que caracteriza la microestructura en un punto $\mathbf{x}^{(\mu)}$ del dispositivo Ω_{libre}	28
3.4.	Soluciones óptimas sin filtrado de densidad. Distribución de la fracción de cobre (d_A), orientación de las láminas de cobre y PDMS, y temperatura T en el dispositivo concentrador.	31

3.5. Soluciones óptimas utilizando filtrado de densidad. Distribución de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PDMS (d_B), y orientación de las láminas de cobre y PDMS en el dispositivo concentrador.	31
3.6. Distribución de las componentes Cartesianas de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo concentrador, dadas en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	32
3.7. (a) Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$; la diferencia entre isoterms es 2°C . (b) Perfil de temperatura a lo largo de a-d.	32
3.8. Dominio de análisis para el problema de camuflaje y bloqueo térmico.	35
3.9. (a) Malla de elementos finitos del dominio de análisis Ω ; los elementos azules pertenecen al dispositivo manipulador de flujo térmico Ω_{libre} , y los rojos poseen flujo de calor prescrito. (b) Elemento de Volumen Representativo (RVE) de la microestructura en un elemento perteneciente al dispositivo.	35
3.10. Variación de la fracción de cobre (d_A), de la de PDMS (d_B), y de la orientación de las láminas de cobre-PDMS del dispositivo bloqueador-camuflador.	36
3.11. Placa de cobre perforada del experimento de bloqueo-camuflaje propuesto por Schittny et al. (2013) (imagen adaptada).	37
3.12. Componentes cartesianas de la conductividad térmica efectiva del dispositivo bloqueador-camuflador, en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	37
3.13. Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$. La diferencia entre isoterms es 1°C	37
3.14. Dominio Ω , unión de la región Ω_{disp} ocupada por el dispositivo, la región Ω_{inv} de inversión de flujo, y la región Ω_{cloak} donde no debe alterarse el flujo de calor.	38
3.15. Soluciones óptimas (con filtrado de densidad). Distribución de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PMMA (d_B), y orientación de las láminas de cobre y PMMA en el dispositivo inversor.	41
3.16. Distribución de las componentes Cartesianas de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo inversor, dadas en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	41
3.17. Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$; la diferencia entre isoterms es 0.9923°C	42
3.18. Soluciones óptimas (con filtrado de densidad y restricción de simetría). Distribución de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PMMA (d_B), y orientación de las láminas de cobre y PMMA en el dispositivo inversor.	42
3.19. Distribución de las componentes Cartesianas de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo inversor, dadas en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$	42

3.20. Distribución de temperatura en la placa, en °C; la diferencia entre isoterms es 0.9923 °C.	43
3.21. Soluciones óptimas con filtrado de densidad y restricción de simetría. a) Distribución de la fracción de cobre (d_A). b) Orientación de las láminas de cobre y PMMA. c) Distribución de temperatura en la placa, en °C; la diferencia entre isoterms es 0.9923 °C.	44
3.22. Ejemplo de validación: a) dominio de análisis, b) metamaterial utilizado para construir el dispositivo, c) malla de elementos finitos del dominio Ω ; los elementos celestes pertenecen al dispositivo, y en los rojos se prescribe flujo de calor nulo.	47
3.23. Ejemplo de validación: a) variable de diseño $\rho_1^{(e)}$ óptima, b) variable de diseño $\rho_2^{(e)}$ óptima, c) fracción del laminado a 45° para los valores óptimos de $\rho_1^{(e)}$ y $\rho_2^{(e)}$, d) dispositivo final, e) temperatura (mapa de colores con isoterms cada 2°C) y flujo de calor (flechas) en toda la placa.	48
3.24. Ejemplo de concentración y camuflaje del flujo de calor: a) dominio de análisis, b) malla de elementos finitos del dominio Ω ; los elementos celestes pertenecen al dispositivo, y en los rojos y verdes se prescribe flujo de calor para concentración y camuflaje respectivamente.	49
3.25. Ejemplo de concentración y camuflaje térmico: a) dispositivo diseñado por DMO, b) temperatura (mapa de colores con isoterms cada 4°C) y flujo de calor (flechas) en toda la placa, c) temperatura a lo largo de $y = 0$ para el presente dispositivo basado en DMO y para el diseñado en la Sección 3.2.1.	51
3.26. Dispositivo fabricado mediante corte por chorro de agua del material conductor, y polimerización del material aislante en los canales resultantes del corte.	52
3.27. Solución óptima para el dispositivo inversor de flujo térmico con camuflaje: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isoterms separadas por 0.9923 K; c) temperatura a lo largo de la línea AF.	56
3.28. Solución óptima para el dispositivo inversor de flujo térmico: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isoterms separadas por 0.9923 K; c) temperatura a lo largo de la línea AF.	58
3.29. RMSE para la tarea de inversión en función del parámetro w^* (el umbral por encima del cual se supone que la fracción de cobre es unitaria).	58
3.30. Dispositivo inversor de flujo térmico luego del filtrado de blanco y negro de la solución óptima: a) Distribución de material; b) temperatura en la placa, con isoterms separadas por 0.9923 K; c) temperatura a lo largo de la línea AF.	59

3.31. Solución óptima para el dispositivo concentrador de flujo térmico: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isothermas separadas por 0.9923 K.	61
3.32. Solución óptima para el dispositivo bloqueador de flujo térmico: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isothermas separadas por 0.9923 K.	61
3.33. Experimento de inversión de flujo térmico: a) dispositivo artesanal; b) dominio de análisis; c) configuración del experimento.	62
3.34. Imágenes térmicas de la placa de agar y del dispositivo obtenidas con la cámara infrarroja: a) 45 minutos; b) 80 minutos; y c) 110 minutos.	63
3.35. Temperatura a lo largo de la línea AF: experimental vs. numérica.	64
4.1. Dominio, condiciones de borde de carga y desplazamientos en el cuerpo Ω con una inclusión Ω_{incl} , que debe ser camuflada utilizando el dispositivo Ω_{disp} con una microestructura no homogénea.	66
4.2. Geometría y carga para el ejemplo de camuflaje mecánico bajo un solo estado de carga.	71
4.3. Malla de elementos finitos para la placa sin y con agujero.	71
4.4. Caso de una sola carga. Distribución de material y desplazamientos para la placa homogénea sin agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado; los desplazamientos están en metros.	73
4.5. Dominio $\Omega = \Omega_{cloak} \cup \Omega_{disp} \cup \Omega_{incl}$ y condiciones de borde del problema termo-mecánico. Arriba, el Elemento de Volumen Representativo (RVE) caracterizando la microestructura en el dispositivo Ω_{disp}	75
4.6. Caso de una sola carga. Distribución de material y desplazamientos para la placa homogénea sin agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado; los desplazamientos están en milímetros.	79
4.7. Caso de una sola carga. Distribución de material y desplazamientos para la placa homogénea sin agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado utilizando diferentes dispositivos; los desplazamientos están en milímetros.	83
4.8. Geometría y cargas para el ejemplo de camuflaje mecánico bajo un estado de dos cargas.	85

4.9. Caso de múltiples cargas. Distribución de material y desplazamientos bajo el estado de compresión horizontal para la placa homogénea sin el agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado utilizando diferentes dispositivos; los desplazamientos están en milímetros.	87
5.1. Problema de manipulación de flujo de calor en el dominio Ω , donde las propiedades efectivas en cada sub-dominio $\Omega^{(e)}$ dependen de un grupo de parámetros $\mathbf{p}^{(e)}$	90
5.2. Dominio de análisis Ω para el diseño de un bloqueador térmico, y condiciones de borde del problema. A la derecha se detalla el Elemento de volumen representativo (RVE) correspondiente al elemento $\Omega^{(e)}$	94
5.3. Distribución óptima de microparámetros en el metadispositivo (Ω_{disp}). Espesor relativo de las láminas de cobre (d_A), y orientación del laminado ($ \theta $).	97
5.4. Propiedades óptimas en el metadispositivo (Ω_{disp}). Capacidad calorífica efectiva ρc , y componentes k_{ij} de la conductividad térmica efectiva con respecto al marco Cartesiano xy	97
5.5. Campo de temperatura y líneas de flujo de calor en el dominio Ω para diferentes instantes de tiempo.	98
5.6. Temperatura a lo largo del eje x (eje de simetría) para distintos instantes de tiempo para el dominio Ω con y sin el metadispositivo.	98
5.7. Distribución óptima de microparámetros en el metadispositivo (Ω_{disp}) diseñado para régimen estacionario. Espesor relativo de las láminas de cobre (d_A), y orientación del laminado ($ \theta $).	99
5.8. Evolución del error instantáneo g en el cumplimiento de la tarea de bloqueo térmico para los metadispositivos diseñados, en relación con el error instantáneo g_0 para el caso del dominio homogéneo.	100
5.9. Evolución de la temperatura en el centro de Ω_{fijint} desde la segunda etapa de calentamiento ($t = 30000$ s).	100
5.10. Distribución óptima de microparámetros en el metadispositivo (Ω_{disp}) para camuflaje y bloqueo térmico. Espesor relativo de las láminas de cobre (d_A), y orientación del laminado ($ \theta $).	101
5.11. Campo de temperatura y líneas de flujo de calor en el dominio Ω para diferentes instantes de tiempo para el metadispositivo camuflador y bloqueador térmico. . .	102

Índice de tablas

4.1. Propiedades mecánicas efectivas de un laminado formado por materiales A y B referidas al marco Cartesiano local $\lambda\tau z$	69
4.2. Propiedades térmicas efectivas de un laminado formado por materiales A y B referidas al marco Cartesiano local $\lambda\tau z$	76
4.3. Dependencia del módulo de Young (en GPa) con la temperatura tanto para el nylon, aluminio y polietileno.	76
4.4. Propiedades térmicas y mecánicas del nylon, aluminio y polietileno.	76

Capítulo 1

Introducción

1.1. Motivación

La idea de encontrar nuevos materiales con propiedades efectivas exóticas, o que van más allá de las propiedades de los materiales que se encuentran en la naturaleza, ha cautivado el interés de la comunidad científica mundial. Una forma que está tomando gran impulso para lograr estos nuevos y muy avanzados materiales es la manipulación racional de la microestructura de un material, transformándolo en un “metamaterial” (el prefijo meta viene del griego y refiere a “más allá de”), con propiedades especialmente favorables para aplicaciones ingenieriles específicas. Este nuevo material posee propiedades que dependen mayoritariamente de la geometría de la microestructura, y en menor medida de la naturaleza de los constituyentes de la misma. Un metamaterial será superior, ya sea en rendimiento o en costo o en ambos, a los materiales ordinarios disponibles para tales aplicaciones. La idea de diseñar la microestructura de un material no es algo nuevo. Ya en 1873 [Maxwell y Thompson \(1904\)](#) propusieron la noción de laminados, y luego en 1920, [Lindman \(1920\)](#) usó un laminado formado por cobre y algodón para crear un metamaterial electromagnético, el cual poseía gran actividad óptica resonante a frecuencias de micro-ondas. Continuando con esta manipulación de microestructura, [Maldovan \(2013\)](#) reconoce en la misma la oportunidad de desarrollar materiales revolucionarios para controlar la propagación de calor, uno de los objetivos específicos que se persigue con el desarrollo de esta Tesis.

El concepto de metamaterial está comúnmente asociado al Electromagnetismo, campo en el que se han conseguido metamateriales de propiedades extremas e impensadas, como refracción negativa e invisibilidad ([Pendry et al., 2006](#); [Sihvola, 2007](#); [Shamonina y Solymar, 2007](#); [Zheludev, 2010](#); [Kadic et al., 2013](#)). [Kadic et al. \(2013\)](#) destacan que los metamateriales en Mecánica y Termodinámica son muy recientes y mucho menos avanzados que en Electromagnetismo, pero al mismo tiempo, hacen notar que Termodinámica y Electromagnetismo son matemáticamente equi-

valentes en el caso estacionario, lo que invita a servirse de los avances en Electromagnetismo. Si bien la Termodinámica es un área de la ciencia muy bien conocida y la idea de calor se conoce desde hace mucho tiempo, a veces se pierde la idea de cuán difícil es guiar el flujo de calor a voluntad en determinadas aplicaciones. Manipular ese flujo térmico tiene implicancias considerables más allá de la propia curiosidad científica, y puede dar origen a aplicaciones muy novedosas, como ser el desarrollo de dispositivos térmicos análogos a los transistores, rectificadores y diodos electrónicos (Narayana y Sato, 2012). Para ello, es necesario controlar la magnitud y la dirección del flujo calor usando (meta)materiales con una distribución prescrita de conductividad térmica anisótropa. Narayana y Sato (2012) dan cuenta de esto y muestran ejemplos impresionantes de bloqueo, concentración e inversión del flujo térmico. Inclusive, Fan et al. (2008) hablan de conductividad térmica aparente negativa por inversión del flujo térmico en uno de sus dispositivos diseñados, lo que afirma la potencialidad de los metamateriales térmicos.

En lo que concierne a la respuesta mecánica en tensión-deformación de los metamateriales, ya no se encuentran analogías con el Electromagnetismo. Eso no impide que la manipulación de la microestructura habilite respuestas extraordinarias como, por ejemplo, relaciones de Poisson negativas (Almgren, 1985; Lakes, 1987; Theocaris et al., 1997; Bückmann et al., 2012; Babae et al., 2013), compresibilidad negativa (Bückmann et al., 2014) y ultra rigidez a ultra bajo peso (Zheng et al., 2014), todas ellas propiedades extremas difíciles de lograr con materiales ordinarios.

El diseño de metamateriales se basa tradicionalmente en el concepto de “transformación de coordenadas” (Pendry et al., 2006) o “mapeo conforme” (Leonhardt, 2006), en donde las ecuaciones constitutivas permanecen invariantes ante un cambio de coordenadas del sistema. Se requiere un importante desarrollo matemático, el cual a su vez depende de cada tipo de problema y está limitado a condiciones de borde y de geometría simples. Además, esta metodología solo permite determinar las propiedades que debe cumplir punto a punto el metamaterial, y no dice nada acerca de cómo obtener las mismas, por lo que nuevas metodologías de diseño de metamateriales que presten especial atención a esta desventaja contribuirán en gran medida al desarrollo y expansión de estos nuevos materiales.

1.2. Diseño de metamateriales por transformación de coordenadas

Materiales para controlar ondas electromagnéticas fueron los primeros en ser estudiados. De los trabajos de Pendry et al. (1996, 1999) surgió el término “metamaterial”, un nuevo tipo de material en donde sus propiedades dependen solo de su microestructura (de tamaño menor que la longitud de onda con la que interactúa) y no de las propiedades químicas de sus constituyentes. Por ejemplo, un material con índice de refracción negativa en el rango de micro-ondas fue obtenido

(Smith et al., 2000). A su vez, la misma propiedad se logró tanto para frecuencias del orden de Gigahertz como frecuencias visibles (Shelby, 2001; Houck et al., 2003; Grbic y Eleftheriades, 2004; Shalaev et al., 2005). La metodología de diseño de estos materiales fue propuesta por Pendry et al. (2006) y Leonhardt (2006) simultáneamente, en lo que llamaron transformación de coordenadas y mapeo conforme respectivamente. Consiste en un mapeo de las coordenadas de un dominio sin deformar a uno deformado, y la introducción de este mapeo en las ecuaciones de balance del problema. Primeramente fue aplicado a Electromagnetismo, en donde se comprobó que las ecuaciones de Maxwell permanecían invariantes ante este cambio de coordenadas, no sucediendo lo mismo con el índice de refracción, en donde la permeabilidad y la permisividad eran escaladas por un factor común. Aplicada esta metodología, las propiedades punto a punto del material eran determinadas en función de la tarea que se le solicitaba al metamaterial. En el caso de Pendry et al. (2006) se buscaba diseñar un material para camuflar un objeto de la radiación electromagnética.

Beneficiándose de la analogía entre Electromagnetismo y Termodinámica en estado estacionario, algunos investigadores desarrollaron materiales con propiedades térmicas sin precedentes para la manipulación del flujo de calor, como por ejemplo, el inversor de flujo térmico de Narayana y Sato (2012) o el camuflador térmico de Schittny et al. (2013). Esta metodología de diseño consiste en adaptar apropiadamente la transformación de coordenadas de Electromagnetismo a la ecuación de Fourier para conducción de calor (Narayana y Sato, 2012; Fan et al., 2008; Chen et al., 2008; Guenneau et al., 2012; Schittny et al., 2013). Este enfoque ha sido aplicado a problemas específicos de manipulación térmica, y problemas generales todavía no han sido abordados, es decir, cuando tanto el metamaterial o el dispositivo a fabricar con el no es de geometría simple, o cuando el flujo de calor debe ser manipulado en forma general (magnitud y dirección arbitrarias), o cuando el flujo de calor externo no es homogéneo. Además, las propiedades requeridas punto a punto en algunos casos requieren valores extremos difíciles de alcanzar, como ser, conductividad nula o infinita, lo que dificulta la fabricación de estos nuevos materiales.

En el caso de sólidos elásticos, según Milton et al. (2006), las ecuaciones de la mecánica del continuo no cumplen con estas características de invariancia, y no pueden hacerse las mismas analogías con Electromagnetismo. Si bien esto no impidió el desarrollo de materiales avanzados aplicados a Elasticidad, se debió recurrir a otros enfoques diferentes de transformación de coordenadas (Stenger et al., 2012; Kadic et al., 2012; Bückmann et al., 2014, 2015).

1.3. Diseño computacional de materiales

Manipular la microestructura de un material permite controlar a voluntad la respuesta macroscópica del mismo, por lo que surgen posibilidades fascinantes de aplicación de las herra-

mientas de diseño computacional de materiales (DCM) desarrolladas por Fachinotti et al. (2013, 2015c,b,a) al diseño de metamateriales. Dichas herramientas permiten optimizar la respuesta macroscópica de un material (o de la pieza fabricada con este) tomando como variables de diseño los parámetros que definen la microestructura en todo el material. Así, por ejemplo, el guiado del flujo de calor en un dominio macroscópico variando espacialmente la conductividad anisótropa (lo que se consigue interviniendo sobre la microestructura) resulta entonces un caso particular de aplicación.

En un primer enfoque, conocido como FMO (Kocvara y Stingl, 2007), las variables que caracterizan la microestructura en un punto son las mismas propiedades efectivas en el punto. Sabiendo además que en el punto a nivel macroscópico se necesita una propiedad térmica o mecánica dada, generalmente anisótropa, la misma puede obtenerse usando optimización topológica a nivel del volumen elemental representativo de ese punto (Giusti y Novotny, 2012). Alternativamente, si se trabaja con un material “cuantitativamente caracterizable” (por ejemplo, un sólido con inclusiones elípticas caracterizado por la densidad, elipticidad y orientación de las inclusiones (Kachanov y Sevostianov, 2005)), sus propiedades físicas pueden controlarse, en magnitud y anisotropía, variando los parámetros que definen la microestructura del material.

Una vez diseñado computacionalmente un metamaterial (atendiendo a la fabricabilidad de su microestructura), el mismo podría realizarse usando técnicas de fabricación aditiva, como ser microestereolitografía de proyección (Zheng et al., 2014), deposición de metales con forma (SMD) (Bishop, 2010), escritura directa con láser por inmersión (Bückmann et al., 2012) o impresión 3D (Bückmann et al., 2014).

1.3.1. Diseño de metamateriales basado en optimización

La utilización de técnicas de optimización ha demostrado ser adecuada y eficiente para trabajar con dominios arbitrarios y suplir las desventajas del diseño por transformación de coordenadas. En lo que refiere al campo del Electromagnetismo, se ha reportado la aplicación de técnicas de optimización para encontrar los parámetros desconocidos de las láminas de un dispositivo camuflador, utilizando algoritmos basados en gradientes (Xi et al., 2009), como así también algoritmos genéticos (Popa y Cummer, 2009). Aplicado al campo térmico, la primera realización de dispositivos para manipulación de flujo de calor fue llevada a cabo por Dede (2010), que formuló el problema de diseño de metamateriales como un problema de optimización, cuya solución proveía la distribución espacial del metamaterial. De esta manera, Dede determinó la variación de la orientación de las inclusiones en una placa de material compuesto con el objetivo de minimizar la resistencia térmica de la misma. Luego, Dede et al. (2013a) determinaron la distribución de esa orientación

en dispositivos para inversión de calor, concentración o camuflaje en alguna porción de esa placa. Cada una de esas tareas era representada por una función objetivo específica, que era formulada para cada caso particular de manipulación térmica. Este último aspecto es la principal desventaja de la metodología seguida por Dede, sumado a que ha sido aplicada solamente al campo de la manipulación de calor. En la presente Tesis, se plantea aplicar al diseño de metamateriales los conocimientos de DCM desarrollados previamente, con el fin de obtener una herramienta computacional de diseño general de metamateriales, tanto para aplicaciones térmicas como mecánicas, eventualmente acopladas. Se tendrá en cuenta la fabricabilidad de los metamateriales diseñados, como así también propiedades termo-dependientes, y se analizarán tanto ejemplos en régimen estacionario como en régimen transitorio.

1.4. Objetivos

1.4.1. Objetivo general

El objetivo principal de esta Tesis es desarrollar, adaptar y aplicar herramientas computacionales para el diseño de materiales avanzados interviniendo sobre su microestructura a fin de alcanzar respuestas macroscópicas controladas a solicitaciones de origen térmico y mecánico (eventualmente acopladas). Estos materiales de diseño o “metamateriales” exhibirán propiedades extraordinarias, especialmente favorables para aplicaciones específicas.

1.4.2. Objetivos particulares

Como objetivos específicos se proponen:

- Diseño computacional de metamateriales térmicos: concentrador, inversor de flujo de calor, y camuflaje térmico.
- Diseño computacional de metamateriales mecánicos: camuflaje mecánico.
- Diseño computacional de metamateriales termo-mecánicos: camuflaje mecánico bajo condiciones de bordes mecánicas y térmicas acopladas.
- Fabricabilidad en el diseño computacional de metamateriales: transformación de un problema de optimización discreta en uno de optimización continua.
- Ensayo experimental de los dispositivos diseñados: evaluación del desempeño de un inversor de flujo térmico.
- Diseño computacional de metamateriales térmicos considerando régimen transitorio.

1.5. Estructura de la Tesis

La presente Tesis se organiza de la siguiente manera: en el Capítulo 1 (Introducción), se hace una breve descripción de las motivaciones que estimularon la realización de la Tesis, haciendo un repaso resumido por la historia de la evolución del desarrollo de metamateriales. Además, se describen las tradicionales metodologías de diseño como así también aquellas que están comenzando a ser aplicadas. Se destacan a su vez los objetivos generales y particulares perseguidos en la presente Tesis. En el Capítulo 2, se explica con detalles el diseño de metamateriales siguiendo las metodologías clásicas de transformación de coordenadas y de mapeo conforme aplicadas a la Termodinámica. Luego, en el Capítulo 3, se plantea la nueva metodología de diseño de metamateriales térmicos en régimen estacionario basada en optimización continua. Se diseñan diferentes dispositivos para manipular el flujo de calor en régimen estacionario, como ser, concentrador de calor, camuflador y bloqueador térmico, e inversor de flujo de calor. También, se aplican los conceptos de Optimización Discreta de Material y de Material Isotrópico Sólido con Penalización, para considerar fabricabilidad y así obtener diseños de más fácil fabricación. Por último, se muestra una validación experimental de uno de los dispositivos diseñados computacionalmente. En el Capítulo 4, se aplica la metodología basada en optimización al diseño de metamateriales mecánicos lineales en régimen estático, y se diseña un dispositivo para camuflaje mecánico. Se consideran también en estos ejemplos la fabricabilidad para simplificar los diseños obtenidos. Luego, en el Capítulo 5, se aplica la metodología de diseño de metamateriales térmicos pero considerando el régimen transitorio. Se diseñan dispositivos para bloquear el flujo térmico, como así también dispositivos que adicionalmente realizan camuflaje térmico. Además, se describe la importancia del diseño de metamateriales considerando el régimen transitorio antes de alcanzar el estado estacionario. Por último, en el Capítulo 6 (Conclusiones), se presentan los puntos y descubrimientos principales que surgen del desarrollo de la Tesis. También, se listan las publicaciones científicas en revistas y congresos que surgen tanto del desarrollo de la misma, como así también de las actividades de investigación del presente Doctorado, y se terminan mencionando algunos alcances que no se incluyen en la presente Tesis y que son interesantes para ser considerados en trabajos futuros.

Capítulo 2

Diseño de metamateriales por transformación de coordenadas

Leonhardt (2006) e independientemente Pendry et al. (2006) descubrieron que una transformación singular puede ser utilizada para lograr invisibilidad a las ondas electromagnéticas. La clave del estudio de Pendry et al. (2006) es un corolario de los resultados de Post (1997), en donde las ecuaciones de Maxwell se mantienen invariantes ante un cambio o transformación de coordenadas adecuado. De esta manera, cubriendo un objeto mediante un ánulo o cáscara hecha de un material específico, el campo electromagnético puede ser controlado, pasando alrededor del objeto y retornando sin ninguna modificación a su trayectoria original, como si el objeto no estuviera presente. Importantes logros en invisibilizar ondas electromagnéticas fueron alcanzados tanto para frecuencias de micro-ondas (Schurig et al., 2006; Liu et al., 2009; Landy y Smith, 2012) como frecuencias visibles (Cai et al., 2007; Valentine et al., 2009; Gabrielli et al., 2009; Ergin et al., 2010; Zhang et al., 2011a; Chen et al., 2011; Chen y Zheng, 2012; Chen et al., 2013a), y esas ideas fueron extendidas satisfactoriamente a otros campos (Wegener, 2013), como Termodinámica (Chen et al., 2008; Li et al., 2010; Guenneau et al., 2012; Schittny et al., 2013; Narayana y Sato, 2012; Han et al., 2013; Xu et al., 2014; Han et al., 2014; Hu et al., 2014; Dede et al., 2013a; Ma et al., 2013; Narayana et al., 2013; Vemuri et al., 2014), Acústica (Chen y Chan, 2007a; Cummer et al., 2008; Zhang et al., 2011b; Zigoneanu et al., 2014), y Mecánica (Bückmann et al., 2014, 2015; Fachinotti et al., 2018b; Hostos et al., 2019). En el caso del calor, la clave para lograr invisibilidad es también la forma invariante de la ecuación del calor en conducción ante una transformación curvilínea (Milton, 2004; Milton et al., 2006). Metamateriales térmicos fueron introducidos inicialmente considerando una cáscara hecha de materiales funcionalmente graduados (sus propiedades pueden variar continuamente en el espacio) para el desarrollo de diferentes camuflajes (Fan et al., 2008). Para esconder un objeto sujeto a un gradiente térmico, el mismo debe recubrirse con un disposi-

tivo especialmente diseñado, de forma que no exista distorsión del campo de temperatura que se encuentra por fuera de ese dispositivo camuflador.

Estos conceptos teóricos fueron probados experimentalmente por [Narayana y Sato \(2012\)](#), los cuales construyeron un bloqueador térmico formado por cilindros concéntricos alternados de goma de látex y silicona, los cuales fueron introducidos en un material base (agua de agar). Bajo un gradiente térmico, el perfil de temperatura por fuera del dispositivo se mantiene casi inalterado cuando se alcanza el estado estacionario. A su vez, motivados e inspirados por este trabajo, [Han et al. \(2013\)](#) diseñaron un bloqueador térmico y establecieron los fundamentos teóricos y de diseño para crear camuflajes térmicos manufacturables utilizando solamente materiales homogéneos distribuidos adecuadamente.

Continuando con el desarrollo de metamateriales térmicos, el problema de transferencia de calor transiente fue solamente tratado por [Guenneau et al. \(2012\)](#), teniendo en cuenta el perfil espacial de la capacidad de calor específica (que no se tiene en cuenta en el caso estacionario de [Narayana y Sato \(2012\)](#)). Adaptaron los conocimientos de las transformaciones en Óptica, gobernada por la ecuación de onda (elíptica), a la Termodinámica, gobernada por la ecuación de calor (parabólica), y los aplicaron al diseño de un camuflaje térmico y de un concentrador de flujo de calor. Siguiendo esta metodología, [Schittny et al. \(2013\)](#) realizaron experimentalmente el primer dispositivo para camuflaje térmico utilizando solo dos materiales isótropos, haciendo que el flujo de calor pasara alrededor de un objeto sin que distorsione el campo de temperaturas exterior al dispositivo, y dando así la impresión de que el objeto no estuviera presente.

En la siguiente Sección se desarrolla en detalle la metodología seguida por [Guenneau et al. \(2012\)](#), junto con las bases de la transformación termodinámica que rigen el diseño de metamateriales térmicos utilizando transformación de coordenadas. Se diseñará un dispositivo para camuflaje térmico, seguidamente de un concentrador de flujo de calor. Se determinarán las propiedades punto a punto que debe poseer el metamaterial para poder cumplir con las tareas de manipulación térmicas deseadas.

2.1. Metamateriales térmicos

Se considera la ecuación de difusión en un dominio heterogéneo Ω de dos dimensiones, con una fuente interna de calor s ,

$$\rho(\mathbf{x})c(\mathbf{x})\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\kappa(\mathbf{x})\nabla u) + s(\mathbf{x}, t) \quad (2.1)$$

donde u es la distribución de temperatura en cada punto $\mathbf{x} = (x, y)$ del dominio Ω , evolucionando en el tiempo $t > 0$.

Ahora, si se produce un cambio de variable $\mathbf{x} = (x, y) \rightarrow \mathbf{x}' = (x', y')$, cuya matriz Jacobiana es $\mathbf{J} = \partial(x', y')/\partial(x, y)$, quiere verse como queda expresada la Ecuación 2.1 en este nuevo sistema de coordenadas. Adelantando un poco este resultado, la nueva ecuación de balance tiene la siguiente forma:

$$\rho(\mathbf{x}')c(\mathbf{x}')\det(\mathbf{J})\frac{\partial u}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{J}^{-T}\kappa(\mathbf{x}')\mathbf{J}^{-1}\det(\mathbf{J})\nabla u) + \det(\mathbf{J})s(\mathbf{x}', t) \quad (2.2)$$

Analizando los diferentes términos de las Ecuaciones (2.1) y (2.2), puede verse que poseen la misma forma, pero ahora, la conductividad transformada

$$\kappa'(\mathbf{x}') = \mathbf{J}^{-T}\kappa(\mathbf{x}')\mathbf{J}^{-1}\det(\mathbf{J}) = \kappa(\mathbf{x}')\mathbf{J}^{-T}\mathbf{J}^{-1}\det(\mathbf{J}) = \kappa(\mathbf{x}')\mathbf{T}^{-1}, \quad (2.3)$$

es una matriz, y aparecen determinantes de la matriz Jacobiana que multiplican a la capacidad calorífica ρc y a la fuente interna s .

Una forma de obtener la Ecuación (2.2), es multiplicar la Ecuación (2.1) por una función suave $\phi \in C_0^\infty(\Omega)$ (infinitamente diferenciable y continua a trozos), y luego integrar por partes:

$$\int_{\Omega} \phi \rho c \frac{\partial u}{\partial t} dx dy + \int_{\Omega} (\nabla \phi \cdot \kappa \nabla u) dx dy - \int_{\partial\Omega} \phi \kappa \nabla u \cdot \mathbf{n} dl - \int_{\Omega} \phi p dx dy = 0 \quad (2.4)$$

donde \mathbf{n} es el versor normal a la frontera $\partial\Omega$ del dominio de integración. Hecho esto, se procede a realizar el cambio de variable $\mathbf{x} = (x, y) \rightarrow \mathbf{x}' = (x', y')$, teniendo en cuenta que $\nabla = \mathbf{J}^{-1}\nabla'$, siendo ∇' el gradiente en el nuevo sistema de coordenadas. Aplicando esto a la Ecuación (2.4), integrando por partes, y teniendo en cuenta que $\mathbf{J}^{-1}\nabla'\phi \cdot \kappa \mathbf{J}^{-1}\nabla'u = (\nabla'\phi)^T \mathbf{J}^{-T} \kappa \mathbf{J}^{-1} \nabla'u$ se obtiene la forma variacional de la Ecuación (2.2):

$$\int_{\Omega} \left\{ \left(\phi \rho c \frac{\partial u}{\partial t} \right) \det(\mathbf{J}) \right\} dx' dy' + \int_{\Omega} \left\{ (\mathbf{J}^{-1}\nabla'\phi \cdot \kappa \mathbf{J}^{-1}\nabla'u) \det(\mathbf{J}) \right\} dx' dy' - \int_{\partial\Omega} \left\{ (\phi \kappa \mathbf{J}^{-1}\nabla'u \cdot \mathbf{n}) \det(\mathbf{J}) \right\} dl' - \int_{\Omega} \left\{ \phi p \det(\mathbf{J}) \right\} dx' dy' = 0 \quad (2.5)$$

Esta ecuación sienta las bases de la transformación termodinámica para el diseño de metamateriales térmicos (Guenneau et al., 2012). De acuerdo con el mapeo o transformación de coordenada seleccionados, se pueden diseñar diferentes metamateriales con aplicaciones específicas. En la siguiente Sección se desarrollará esta metodología para el diseño de dispositivos concentradores de flujo de calor, como así también dispositivos para lograr camuflaje térmico.

2.1.1. Camuflaje térmico

Utilizando la metodología seguida por Pendry et al. (2006) para camuflar una esfera, y adaptándola para camuflar una geometría circular, se considera la siguiente transformación geométrica lineal:

$$\begin{cases} r' = \frac{R_2 - R_1}{R_2} r + R_1, & 0 < r \leq R_2 \\ \theta' = \theta, & 0 < \theta \leq \pi \end{cases} \quad (2.6)$$

La misma mapea el campo que se encuentra en el dominio $r \leq R_2$ sobre el anulo $R_1 \leq r' \leq R_2$. El dominio $r' \leq R_1$ define la zona de invisibilidad, mientras que el anulo representa el dispositivo camuflador formado por un material con conductividad heterogénea y anisótropa $\kappa' = \kappa \mathbf{T}^{-1}$ (ver Figura 2.1). Para hallar la matriz de transformación \mathbf{T}^{-1} se sigue la metodología propuesta por Guenneau et al. (2012), en donde se plantea un mapeo desde un marco Cartesiano $x - y$ a uno $x' - y'$ teniendo en cuenta la transformación (2.6).

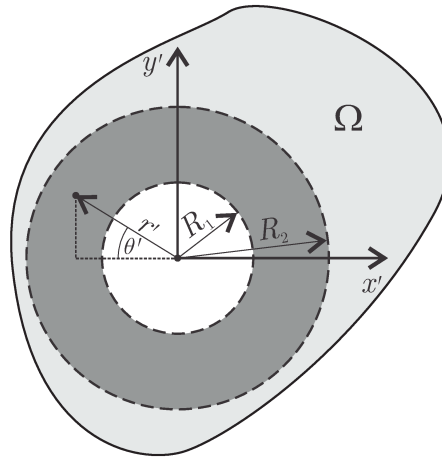


Figura 2.1: Concepto de camuflaje. La región blanca corresponde a la zona de invisibilidad. El anulo gris oscuro representa el dispositivo camuflador.

Se comienza con el cálculo de la matriz Jacobiana de la transformación $(x, y) \rightarrow (r, \theta) \rightarrow (r', \theta') \rightarrow (x', y')$, que se puede expresar como:

$$\mathbf{J}_{(x,x')} = \mathbf{J}_{(x,r)} \mathbf{J}_{(r,r')} \mathbf{J}_{(r',x')} \quad (2.7)$$

A su vez, se tiene:

$$\mathbf{J}_{(x,r)} = \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \theta)} = \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -r \sin(\theta) \\ \sin(\theta) & r \cos(\theta) \end{bmatrix} = \mathbf{R}(\theta) \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r \end{bmatrix} = \mathbf{R}(\theta) \text{diag}(1, r), \quad (2.8)$$

siendo $\mathbf{R}(\theta)$ la matriz de rotación en plano.

$$\mathbf{J}_{(r,\theta)} = \frac{\partial(r,\theta)}{\partial(r',\theta')} = \begin{bmatrix} \frac{R_2}{R_2-R_1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \text{diag} \left(\frac{R_2}{R_2-R_1}, 1 \right) \quad (2.9)$$

$$\mathbf{J}_{(r',\theta')} = \frac{\partial(r',\theta')}{\partial(x',y')} = [\mathbf{J}_{(x',r')}]^{-1} = [\mathbf{R}(\theta') \text{diag}(1, r')]^{-1} = \text{diag}(1, 1/r') \mathbf{R}(\theta')^T, \quad (2.10)$$

por ser $\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^{-1}$.

Introduciendo las Ecuaciones (2.8), (2.9) y (2.10) en (2.7) se llega a:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{(x,x')} &= \mathbf{R}(\theta) \text{diag}(1, r) \text{diag} \left(\frac{R_2}{R_2-R_1}, 1 \right) \text{diag}(1, 1/r') \mathbf{R}(\theta')^T \\ &= \mathbf{R}(\theta) \text{diag} \left(\frac{R_2}{R_2-R_1}, r/r' \right) \mathbf{R}(\theta')^T \end{aligned} \quad (2.11)$$

El determinante de esta matriz Jacobiana es $\det(\mathbf{J}_{(x,x')}) = \frac{R_2}{R_2-R_1} \frac{r}{r'}$ ya que las matrices de rotación $\mathbf{R}(\theta)$ y $\mathbf{R}(\theta')^T$ son unimodulares. Con todo lo calculado anteriormente se puede determinar la matriz de transformación \mathbf{T}^{-1} :

$$\begin{aligned} \mathbf{T}^{-1} &= \mathbf{J}_{(x,x')}^{-T} \mathbf{J}_{(x,x')}^{-1} \det(\mathbf{J}_{(x,x')}) \\ &= \mathbf{R}(\theta) \text{diag} \left(\frac{R_2-R_1}{R_2}, r'/r \right) \mathbf{R}(\theta')^{-1} \mathbf{R}(\theta') \text{diag} \left(\frac{R_2-R_1}{R_2}, r'/r \right) \mathbf{R}(\theta)^T \frac{R_2}{R_2-R_1} \frac{r}{r'} \\ &= \mathbf{R}(\theta') \text{diag} \left(\frac{R_2-R_1}{R_2} \frac{r}{r'}, \frac{R_2}{R_2-R_1} \frac{r'}{r} \right) \mathbf{R}(\theta')^T, \end{aligned} \quad (2.12)$$

donde se aprovechó el hecho de que $\theta' = \theta$. Por último, despejando r de la Ecuación (2.6) y reemplazando en la Ecuación (2.12) se llega la conductividad transformada dentro del dispositivo camuflador,

$$\kappa' = \kappa \mathbf{T}^{-1} = \kappa \left\{ \mathbf{R}(\theta') \begin{bmatrix} \frac{r'-R_1}{r'} & 0 \\ 0 & \frac{r'}{r'-R_1} \end{bmatrix} \mathbf{R}(\theta')^T \right\}, \quad (2.13)$$

donde los autovalores de κ' (valores principales de la conductividad) son:

$$\kappa'_{r'} = \kappa \frac{r'-R_1}{r'}, \quad \kappa'_{\theta'} = \kappa \frac{r'}{r'-R_1}. \quad (2.14)$$

Es importante aclarar que un mapeo más general, en donde el radio r' dependa también de ángulo θ , permitirá mapear dominios con formas arbitrarias (geometrías suaves). Para más detalles consultar los trabajos de Nicolet et al. (2008) y Guenneau et al. (2012). Además, cuando $r' = R_1$ en

las coordenadas transformadas, es decir, $r = 0$ en las coordenadas originales, la matriz de transformación se vuelve singular, ya que el primer coeficiente de la diagonal desaparece y el segundo tiende a infinito, lo que trae aparejado una conductividad radial nula y una tangencial infinita. Es por ello que no se puede mapear un punto ($r = 0$) y se justifican los límites impuestos a la variable r en la Ecuación (2.6).

Respecto a la capacidad calorífica transformada de la Ecuación (2.2), utilizando $r = R_2(r' - R_1)/(R_2 - R_1)$ (despeje de la Ecuación (2.6)) se tiene:

$$\rho'c' = \det(\mathbf{J}_{(x,x')}) \rho c = \frac{r}{r'} \rho c \frac{R_2}{R_2 - R_1} = \frac{r' - R_1}{r'} \left(\frac{R_2}{R_2 - R_1} \right)^2 (\rho c), \quad (2.15)$$

la cual también se vuelve nula para $r' = R_1$ ($r = 0$ en las coordenadas originales). Esto significa que se necesita tiempo infinito para lograr que el flujo de calor cruce la frontera interna del anillo camuflador (Guenneau et al., 2012).

Caso de estudio

A continuación se propone un metamaterial para camuflar y bloquear térmicamente una región determinada del espacio. El dominio de análisis consiste en una placa cuadrada con lados $L = 8$ cm, cuyas paredes laterales están sujetas a una condición de temperatura impuesta, como se aprecia en la Figura 2.2, y las paredes superior e inferior se encuentran aisladas térmicamente. Esto genera un flujo de calor unidimensional que va de izquierda a derecha. El flujo de calor perpendicular a la placa se desprecia, por lo que se considera un problema de transmisión de calor en dos dimensiones. El material base de la placa es poliimida, con conductividad térmica $k^{Pl} = 0.17 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, densidad $\rho^{Pl} = 1400 \text{ kgm}^{-3}$ y calor específico $C_p^{Pl} = 1090 \text{ Jkg}^{-1}\text{K}^{-1}$. El dispositivo camuflador es el anillo Ω_{dis} con radio exterior $R_2 = 3$ cm e interior $R_1 = 2$ cm que rodea la región central que se desea camuflar.

Resultados

Luego de aplicar al dispositivo Ω_{dis} el mapeo dado por la matriz Jacobiana 2.7, las distribuciones de conductividad térmica y capacidad calorífica en el dominio físico con coordenadas Cartesianas (x', y') están definidas por las Ecuaciones (2.13) y (2.15) respectivamente, y pueden apreciarse en las Figuras 2.3a, 2.3b y 2.3c, donde se grafican las mismas en función de r' el intervalo $R_1 < r' \leq R_2$. En la Figura 2.3b puede apreciarse que la conductividad $\kappa'_{\theta'}$ no está definida en $r' = R_1 = 2$ cm, ya que tiende a infinito.

Aplicando el Método de los Elementos Finitos (MEF) se resuelve el problema transitorio dado por la Ecuación (2.2) teniendo en cuenta las propiedades del dispositivo Ω_{dis} definidas previamente

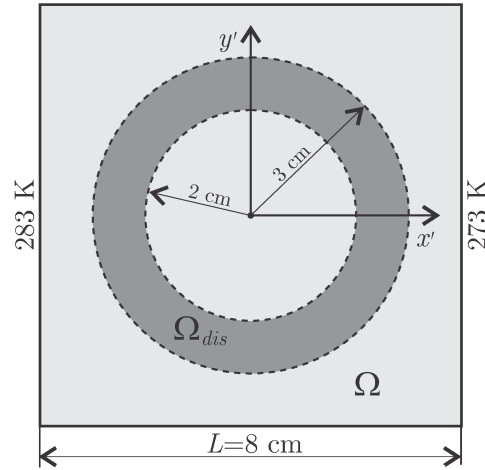


Figura 2.2: Camuflaje térmico utilizando el concepto de transformación de coordenadas.

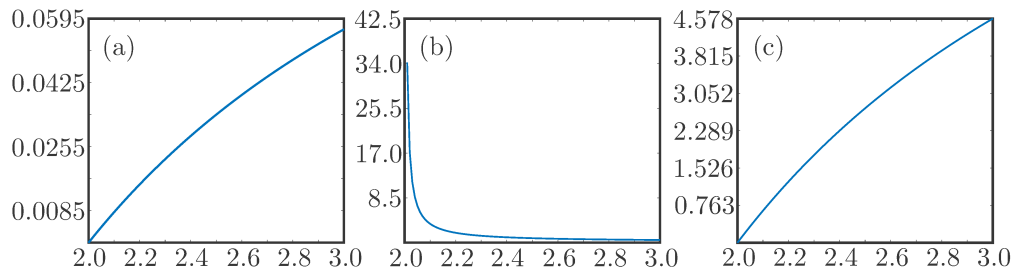


Figura 2.3: (a) Conductividad térmica radial $\kappa'_{r'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (b) Conductividad térmica tangencial $\kappa'_{\theta'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (c) Capacidad calorífica $\rho'c'$ [$\text{MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$].

te. El campo de temperatura en Ω se puede aproximar como:

$$T(\mathbf{x}, t) = N_j(\mathbf{x})T_j(t) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(t) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (2.16)$$

donde N_j es la función de forma asociada al nodo j de la malla de elementos finitos que representa Ω , y T_j es la temperatura de ese nodo (incógnita). En la formulación estándar (Galerkin) de MEF, el vector de temperaturas nodales \mathbf{T} es la solución del sistema algebraico de ecuaciones

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{F}, \quad (2.17)$$

donde \mathbf{C} , \mathbf{K} y \mathbf{F} son las matrices de capacitancia y conductividad global, y el vector de flujos nodales respectivamente, dados por

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \rho c \mathbf{N}^T \mathbf{N} dV, \quad (2.18)$$

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{k} \mathbf{B} dV, \quad (2.19)$$

$$\mathbf{F} = \int_{\Omega} s \mathbf{N} dV, \quad (2.20)$$

con $B_{ij} = \partial N_j / \partial x_i$, tal que $\mathbf{BT} = \text{grad } T$, y $\dot{\mathbf{T}}$ es la derivada temporal de las temperaturas nodales.

Para el término temporal de la temperatura se utiliza un esquema incondicionalmente estable de diferencias finitas hacia atrás (Nithiarasu et al., 2016), lo que da origen al siguiente sistema algebraico de ecuaciones en el instante de tiempo $t + \Delta t$:

$$\mathbf{C} \frac{\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t}{\Delta t} + \mathbf{KT}_{t+\Delta t} = \mathbf{F} \quad (2.21)$$

Se utiliza una malla de 10000 elementos finitos rectangulares bilineales, y un paso de tiempo igual a 100 s. Los resultados del campo de temperatura junto con las isotermas para diferentes instantes de tiempo pueden observarse en la Figura 2.4. Puede verse como se obtiene un gradiente térmico constante dentro del dispositivo a medida que avanza el proceso transitorio. En la Figura 2.4d puede observarse que toda la región a camuflar se encuentra solamente entre dos isotermas, es decir, que la misma permanece casi a temperatura constante (gradiente térmico pequeño). Además, las isotermas que están fuera del dispositivo no se ven alteradas. Las mismas se mantienen siempre paralelas a lo largo del proceso transitorio, en concordancia con el flujo unidimensional resultante de las condiciones de borde del problema. La no distorsión del campo de temperaturas fuera del dispositivo coincide con la definición de camuflaje térmico. De esta manera, un observador que se encuentre censando la temperatura en el dominio exterior al dispositivo no notará la presencia del mismo.

Las propiedades térmicas en el borde interior del anillo ($r' = R_1$ en el dispositivo) no pueden satisfacerse exactamente con MEF, por lo que puede verse un incremento de la temperatura en el interior hasta que se logra un valor estacionario.

2.1.2. Concentración de flujo térmico

Se sigue la misma metodología que en la Sección 2.1.1 pero en este caso se utiliza la siguiente transformación geométrica lineal para concentrar el flujo de calor en un círculo:

$$\begin{cases} r' = \frac{R_1}{R_2} r, & 0 \leq r \leq R_2 \\ r' = \frac{R_3 - R_1}{R_3 - R_2} r + R_3 \frac{R_1 - R_2}{R_3 - R_2}, & R_2 \leq r \leq R_3 \\ \theta' = \theta, & 0 < \theta \leq \pi \end{cases} \quad (2.22)$$

Siendo $R_1 < R_2 < R_3$ la misma mapea el campo que se encuentra en la región $0 \leq r \leq R_2$ sobre la región $0 \leq r' \leq R_1$ (compresión del espacio térmico), y el campo de la región $R_2 \leq r \leq R_3$ sobre $R_1 \leq r' \leq R_3$ (expansión del espacio térmico).

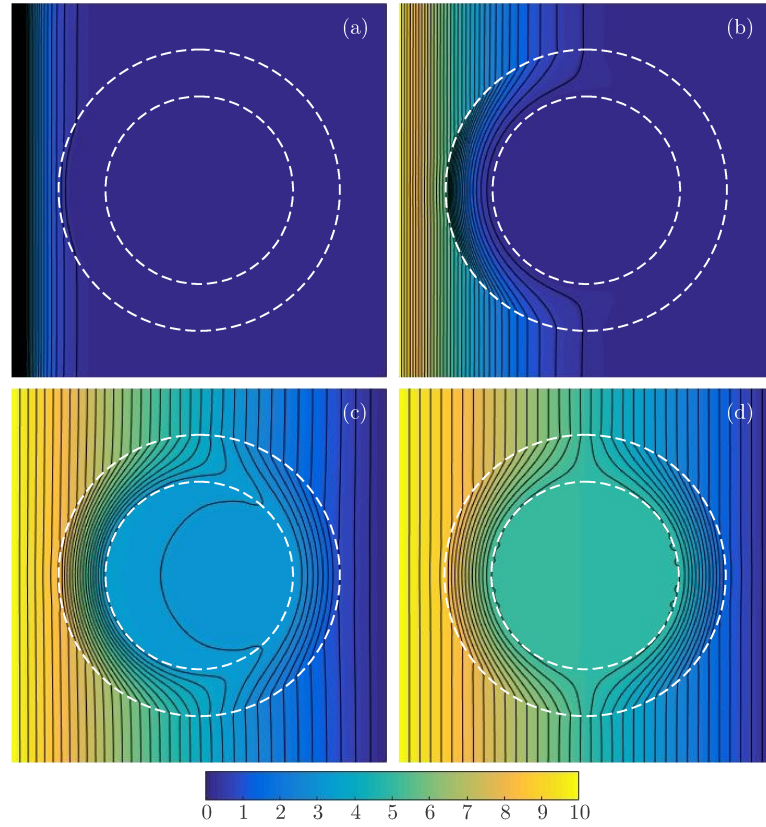


Figura 2.4: Campo de temperatura (en $^{\circ}\text{C}$) e isotermas (cada 0.29°C) en el dominio de análisis para diferentes instantes de tiempo. (a) $t = 100$ s, (b) $t = 1000$ s, (c) $t = 10000$ s y (d) $t = 50000$ s.

Para hallar la matriz de transformación \mathbf{T}^{-1} se sigue nuevamente la metodología de Guenneau et al. (2012) para el mapeo del marco Cartesiano $x - y$ al $x' - y'$. La matriz Jacobiana $\mathbf{J}_{(x,x')}$ tiene la misma estructura que la de la sección anterior, a diferencia del término $\mathbf{J}_{(r,r')}$ en la Ecuación (2.7), el cual, para el intervalo $0 \leq r \leq R_2$, es:

$$\mathbf{J}_{(r,r')} = \begin{bmatrix} \frac{R_2}{R_1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \text{diag} \left(\frac{R_2}{R_1}, 1 \right) \quad (2.23)$$

De esta forma, introduciendo ahora las Ecuaciones (2.8), (2.23) y (2.10) en (2.7) se llega a:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{(x,x')} &= \mathbf{R}(\theta) \text{diag}(1, r) \text{diag} \left(\frac{R_2}{R_1}, 1 \right) \text{diag}(1, 1/r') \mathbf{R}(\theta')^T \\ &= \mathbf{R}(\theta) \text{diag} \left(\frac{R_2}{R_1}, r/r' \right) \mathbf{R}(\theta')^T \end{aligned} \quad (2.24)$$

Obtenida la matriz Jacobiana, se calcula la matriz de transformación \mathbf{T}^{-1} , de la misma forma

que en la Ecuación (2.12).

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}^{-1} &= \mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}^{-T} \mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}^{-1} \det(\mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}) \\
&= \mathbf{R}(\theta) \text{diag} \left(\frac{R_1}{R_2}, r'/r \right) \mathbf{R}(\theta')^{-1} \mathbf{R}(\theta') \text{diag} \left(\frac{R_1}{R_2}, r'/r \right) \mathbf{R}(\theta)^T \frac{R_2}{R_1} \frac{r}{r'} \\
&= \mathbf{R}(\theta') \text{diag} \left(\frac{R_1}{R_2} \frac{r}{r'}, \frac{R_2}{R_1} \frac{r'}{r} \right) \mathbf{R}(\theta')^T,
\end{aligned} \tag{2.25}$$

Despejando r de la Ecuación (2.22) para el intervalo $0 \leq r \leq R_2$, y reemplazando en la Ecuación (2.25) se llega la conductividad transformada,

$$\kappa' = \kappa \mathbf{T}^{-1} = \kappa \left\{ \mathbf{R}(\theta') \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \mathbf{R}(\theta')^T \right\}. \tag{2.26}$$

Siguiendo el mismo procedimiento pero para el intervalo $R_2 \leq r \leq R_3$, donde ahora

$$\mathbf{J}_{(\mathbf{r}, \mathbf{r}')} = \begin{bmatrix} \frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \text{diag} \left(\frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1}, 1 \right), \tag{2.27}$$

se llega a la expresión de la matriz Jacobiana

$$\begin{aligned}
\mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')} &= \mathbf{R}(\theta) \text{diag}(1, r) \text{diag} \left(\frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1}, 1 \right) \text{diag}(1, 1/r') \mathbf{R}(\theta')^T \\
&= \mathbf{R}(\theta) \text{diag} \left(\frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1}, r/r' \right) \mathbf{R}(\theta')^T.
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Luego, la matriz de transformación \mathbf{T}^{-1} se define como:

$$\begin{aligned}
\mathbf{T}^{-1} &= \mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}^{-T} \mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}^{-1} \det(\mathbf{J}_{(\mathbf{x}, \mathbf{x}')}) \\
&= \mathbf{R}(\theta) \text{diag} \left(\frac{R_3 - R_1}{R_3 - R_2}, r'/r \right) \mathbf{R}(\theta')^{-1} \mathbf{R}(\theta') \text{diag} \left(\frac{R_3 - R_1}{R_3 - R_2}, r'/r \right) \mathbf{R}(\theta)^T \frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} \frac{r}{r'} \\
&= \mathbf{R}(\theta') \text{diag} \left(\frac{R_3 - R_1}{R_3 - R_2} \frac{r}{r'}, \frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} \frac{r'}{r} \right) \mathbf{R}(\theta')^T,
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Despejando r de la Ecuación (2.22) para el intervalo $R_2 \leq r \leq R_3$, pero ahora reemplazando en la Ecuación (2.29), se llega la conductividad transformada,

$$\kappa' = \kappa \mathbf{T}^{-1} = \kappa \left\{ \mathbf{R}(\theta') \begin{bmatrix} \frac{r' + R_3 \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_2}}{r'} & 0 \\ 0 & \frac{r'}{r' + R_3 \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_2}} \end{bmatrix} \mathbf{R}(\theta')^T \right\}. \tag{2.30}$$

Resumiendo, los valores principales de la conductividad en el espacio transformado son:

$$\begin{aligned} \kappa'_{r'} &= \kappa, & \kappa'_{\theta'} &= \kappa, & 0 &\leq r' \leq R_1 \\ \kappa'_{r'} &= \kappa \frac{r' + R_3 \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_2}}{r'}, & \kappa'_{\theta'} &= \kappa \frac{r'}{r' + R_3 \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_2}}, & R_1 &\leq r' \leq R_3 \end{aligned} \quad (2.31)$$

donde R_1 y R_3 corresponden a los radios interior y exterior del anillo (dispositivo) respectivamente. En este caso, a diferencia del camuflaje térmico de la Sección 2.1.1, estas conductividades no desaparecen o se vuelven infinitas, dado que cuando se diseña un concentrador no se rompe la métrica, como si se hace cuando se requiere camuflaje. Es decir, existe una correspondencia uno a uno entre la frontera del círculo con radio $r = R_2$ y con el de radio $r' = R_1$ bajo esta transformación geométrica (isoformismo) (Guenneau et al., 2012).

Continuando con la capacidad calorífica transformada de la Ecuación (2.2), y utilizando $r = \frac{R_2}{R_1} r'$ (despeje de la Ecuación (2.22) para $0 \leq r \leq R_2$) se tiene:

$$\rho' c' = \det(\mathbf{J}_{(x,x')}) \rho c = \frac{R_2}{R_1} \frac{r}{r'} \rho c = \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^2 \rho c. \quad (2.32)$$

Haciendo lo mismo pero con $r = \left(r' - R_3 \frac{R_1 - R_2}{R_3 - R_2} \right) \left(\frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} \right)$ (despeje para el intervalo $R_2 \leq r \leq R_3$) se llega a:

$$\rho' c' = \det(\mathbf{J}_{(x,x')}) \rho c = \frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} \frac{r}{r'} \rho c = \frac{r' + R_3 \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_2}}{r'} \left(\frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} \right)^2 \rho c. \quad (2.33)$$

Resumiendo, la capacidad calorífica en el espacio transformado queda definida como:

$$\rho' c' = \det(\mathbf{J}_{(x,x')}) \rho c = \begin{cases} \left(\frac{R_2}{R_1} \right)^2 \rho c, & 0 \leq r' \leq R_1 \\ \frac{r' + R_3 \frac{R_2 - R_1}{R_3 - R_2}}{r'} \left(\frac{R_3 - R_2}{R_3 - R_1} \right)^2 \rho c, & R_1 \leq r' \leq R_3 \end{cases} \quad (2.34)$$

Caso de estudio

Se propone diseñar un metamaterial para concentrar el flujo de calor en una región determinada del espacio. El dominio de análisis consiste en una placa cuadrada con lados $L = 8$ cm, cuyas paredes laterales están sujetas a una condición de temperatura impuesta, como se aprecia en la Figura 2.5, y las paredes superior e inferior se encuentran aisladas térmicamente. Esto genera nuevamente un flujo de calor unidimensional que va de izquierda a derecha. El flujo de calor perpendicular a la placa se desprecia, por lo que se considera otra vez un problema de transmisión de calor en dos dimensiones. El material base de la placa es poliimida, cuyas propiedades están

definidas en la Sección 2.1.1. El dispositivo concentrador es el anillo Ω_{dis} con radio exterior $R_3 = 3$ cm e interior $R_1 = 1$ cm que rodea la región central en la que se desea concentrar la energía térmica. El radio R_2 para la compresión y expansión del espacio térmico tiene un valor de 2 cm.

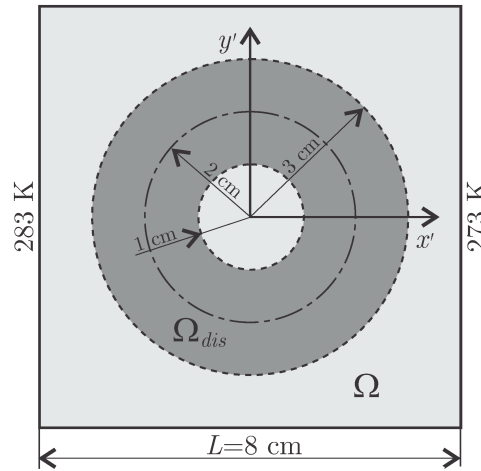


Figura 2.5: Camuflaje térmico utilizando el concepto de transformación de coordenadas.

Resultados

Luego de aplicar al dispositivo Ω_{dis} el mapeo dado por la matriz Jacobiana (2.7), las distribuciones de conductividad térmica y capacidad calorífica en el dominio físico con coordenadas Cartesianas (x', y') están definidas por las Ecuaciones (2.31) y (2.34) respectivamente, y pueden apreciarse en las Figuras 2.6a, 2.6b y 2.6c, donde se grafican las mismas en función de r' en el intervalo $0 \leq r' \leq R_3$.

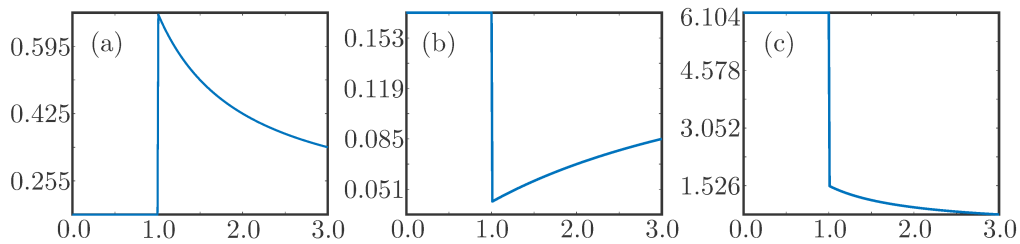


Figura 2.6: (a) Conductividad térmica radial $\kappa'_{r'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (b) Conductividad térmica tangencial $\kappa'_{\theta'}$ [$\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$]. (c) Capacidad calorífica $\rho'c'$ [$\text{MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$].

Aplicando nuevamente MEF, se resuelve el problema transitorio dado por la Ecuación (2.2) teniendo en cuenta las propiedades del dispositivo Ω_{dis} definidas previamente. Para el término temporal se adopta también el esquema incondicionalmente estable de diferencias finitas hacia atrás de la Sección 2.1.1. Se utiliza una malla de 10000 elementos finitos rectangulares bilineales, y un paso de tiempo igual a 100 s. Los resultados del campo de temperatura junto con las isoterma para diferentes instantes de tiempo pueden observarse en la Figura 2.7. Claramente puede verse como se concentra el flujo de calor en el interior del anillo (concentración de isoterma), y como las

isotermas no se ven alteradas fuera del dispositivo, fenómeno que indica nuevamente la presencia de camuflaje térmico. Más allá de que en este ejemplo no se está exigiendo camuflaje térmico en el exterior del dispositivo, la metodología de transformación de coordenadas o mapeo espacial tiene como efecto colateral este fenómeno.

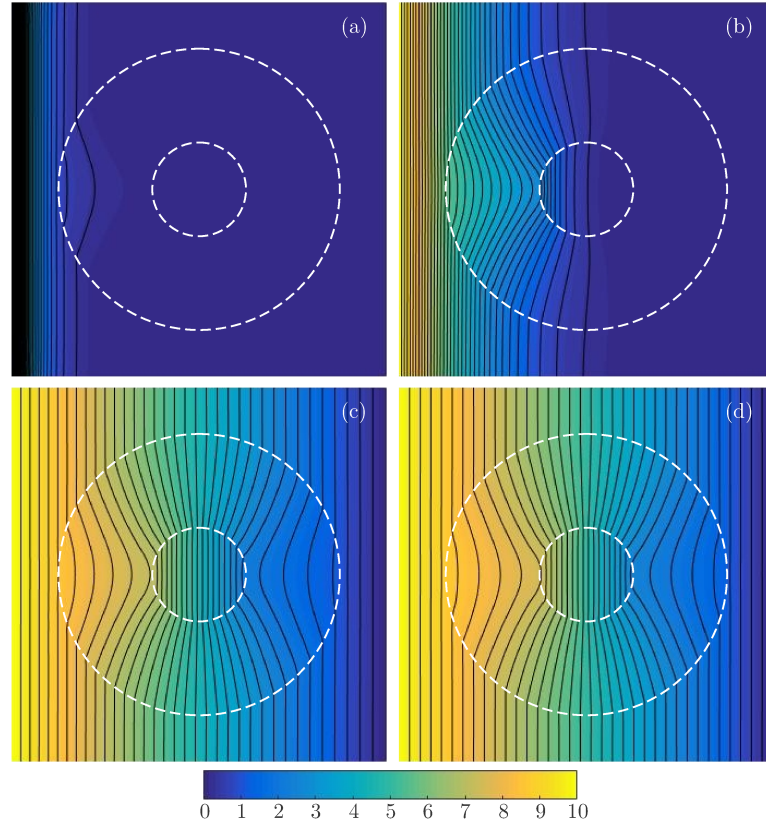


Figura 2.7: Campo de temperatura (en $^{\circ}\text{C}$) e isotermas (cada 0.29°C) en el dominio de análisis para diferentes instantes de tiempo. (a) $t = 100$ s, (b) $t = 1000$ s, (c) $t = 10000$ s y (d) $t = 30000$ s.

Los ejemplos mostrados en la presente Sección demuestran la potencialidad de la metodología de transformación de coordenadas (Leonhardt, 2006; Pendry et al., 2006) aplicada al campo de la Termodinámica para el diseño de metamateriales térmicos. Se destaca la necesidad de realizar una transformación o mapeo por cada tarea de manipulación deseada. Consecuentemente, una vez elegida esa tarea, hay que pensar o encontrar qué mapeo se debe realizar para lograr la misma. Por ejemplo, si se quiere lograr concentración y simultáneamente inversión de flujo térmico, se tiene que pensar en un mapeo de compresión del espacio térmico, junto con uno de rotación, lo que exige nuevamente un desarrollo matemático diferente. Por último, la presente metodología brinda las propiedades punto a punto que debe cumplir el metamaterial, pero no dice nada de cómo fabricar el mismo. Además, algunas de las propiedades exigidas tienen valores extremos, como sucede en el ejemplo de camuflaje térmico, en donde el borde interior del dispositivo requiere de una conductividad radial nula y una tangencial infinita.

Capítulo 3

Diseño computacional de metamateriales térmicos en régimen estacionario

3.1. Metamateriales térmicos

El desarrollo de metamateriales térmicos surge de la idea de adaptar las metodologías de transformación de coordenadas utilizadas en el diseño de metamateriales en Electromagnetismo (Leonhardt, 2006; Pendry et al., 2006), a la ecuación de Fourier para transferencia de calor por conducción. De esta manera, se desarrollaron materiales con propiedades térmicas impensadas o extremas. La manipulación de flujo de calor utilizando estos nuevos materiales brinda técnicas interesantes para manipular la energía térmica, y el desarrollo de los mismos puede permitir un control sin precedentes de la conducción térmica (Maldovan, 2013).

Como se detalla en el Capítulo 2, la metodología de transformación de coordenadas o mapeo solo permite determinar las propiedades que debe cumplir punto a punto el metamaterial, sin decir nada sobre cómo materializarlas, sumado al hecho de que se debe encontrar un mapeo adecuado en función de la tarea de manipulación térmica que se quiera lograr. Por todo esto, es necesario encontrar o desarrollar metodologías de diseño de metamateriales que presten especial atención a estos puntos de manera de poder seguir contribuyendo al desarrollo y expansión de estos nuevos materiales, y poder llevar a escala industrial la fabricación de dispositivos con propiedades térmicas extraordinarias. En virtud de ello, se propone utilizar las ideas de diseño computacional de materiales desarrolladas en trabajos previos (Fachinotti et al., 2013, 2015c,b,a) y aplicarlas al diseño de metamateriales térmicos para aplicaciones generales. Se podrá así diseñar la respuesta macroscópica de un material, tomando como variables de diseño la estructura punto a punto

del mismo. Para lograr esto, se pueden plantear dos metodologías. Por ejemplo, si sabe la propiedad punto a punto que se necesita cumplir, la misma puede obtenerse usando optimización topológica a nivel del volumen elemental representativo de ese punto (Giusti y Novotny, 2012). Alternativamente, si se trabaja con un material “cuantitativamente caracterizable”, es decir, que sus propiedades están definidas a nivel de volumen elemental por un número finito de parámetros, las mismas pueden controlarse, en magnitud y anisotropía, variando esos parámetros que definen la microestructura del material. Adoptando este último enfoque, en la siguiente Sección se propone desarrollar una metodología de diseño computacional de metamateriales térmicos que permita sortear las falencias explicitadas del diseño por transformación de coordenadas.

3.1.1. Conducción del calor en un cuerpo heterogéneo

Para comenzar con el diseño de estos nuevos materiales, se considera primeramente un dominio en dos dimensiones representado como Ω en la Figura 3.1, hecho de un material heterogéneo, con frontera $\partial\Omega$ dividida en dos partes no superpuestas: $\partial\Omega_q$ (en donde el flujo q_{pared} está prescrito) y $\partial\Omega_T$ (en donde la temperatura T_{pared} está prescrita). En régimen estacionario, la conducción de calor en Ω está gobernada por la ecuación

$$\text{div}(\mathbf{q}) = s \quad \text{en } \Omega, \quad (3.1)$$

y las condiciones de borde:

$$T = T_{\text{pared}} \quad \text{en } \partial\Omega_T, \quad (3.2)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = q_{\text{pared}} \quad \text{en } \partial\Omega_q, \quad (3.3)$$

donde \mathbf{q} es el campo vectorial del flujo de calor, s es la fuente interna de calor, T es la temperatura, y \mathbf{n} es el vector unitario normal a $\partial\Omega$.

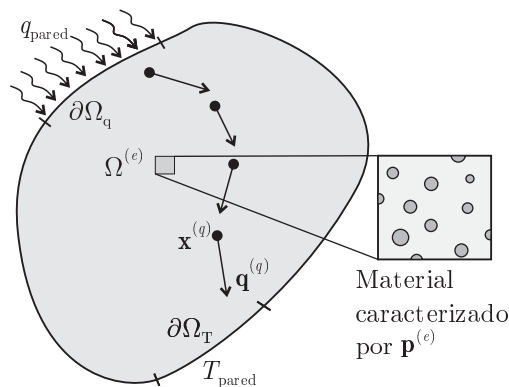


Figura 3.1: Problema de manipulación de flujo de calor en el dominio Ω , donde las propiedades efectivas en cada sub-dominio $\Omega^{(e)}$ dependen de un grupo de parámetros $\mathbf{p}^{(e)}$.

Asumiendo que el flujo de calor obedece la Ley de Fourier, el mismo está dado por:

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k} \text{grad } T, \quad (3.4)$$

donde \mathbf{k} es la conductividad térmica efectiva (tensor de segundo orden).

Usando el método de los elementos finitos (MEF), el campo de temperatura en Ω se aproxima como:

$$T(\mathbf{x}) = N_j(\mathbf{x})T_j = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T} \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega. \quad (3.5)$$

En la formulación estándar (Galerkin) de MEF, el vector de temperaturas nodales \mathbf{T} es la solución del sistema algebraico de ecuaciones

$$\mathbf{KT} = \mathbf{F}, \quad (3.6)$$

donde \mathbf{K} es la matriz de conductividad global (Ecuación (2.19)), y \mathbf{F} el vector de flujos nodales, en este caso dado por

$$\mathbf{F} = \int_{\Omega} s\mathbf{N} \, dV + \int_{\partial\Omega_q} q_{\text{pared}}\mathbf{N} \, dS. \quad (3.7)$$

El sistema de ecuaciones (3.6) es la versión de elementos finitos de la conducción de calor (3.1), sujeta a las condiciones de borde (3.2) y (3.3), para el flujo de calor obediendo la Ley de Fourier (3.4). Esto es un problema clásico de MEF, cuyos detalles pueden encontrarse por ejemplo en el libro de [Zienkiewicz y Taylor \(2000\)](#) (fundamentos de MEF).

Se asume que Ω es un cuerpo heterogéneo, específicamente que el material varía elemento a elemento en la malla de elementos finitos $\Omega = \Omega^{(1)} \cup \Omega^{(2)} \cup \dots \cup \Omega^{(E)}$. En el elemento finito $\Omega^{(e)}$, las propiedades materiales o efectivas son funciones de un número finito de parámetros agrupados en el vector $\mathbf{p}^{(e)} = [p_1^{(e)}, p_2^{(e)}, \dots, p_M^{(e)}]$, como se muestra en la Figura 3.1, es decir, el material es cuantitativamente caracterizable a nivel de $\Omega^{(e)}$. Algunos ejemplos de esos parámetros pueden ser la orientación de fibras en polímeros reforzados con fibras ([Lund y Stegmann, 2005](#)), la densidad y factores de irregularidad en materiales con inhomogeneidades aisladas ([Kachanov y Sevostianov, 2005](#); [Tsukrov y Kachanov, 2000](#)), el tamaño de partículas en implantes dentales ([Rungsiyakull et al., 2010](#); [Chen et al., 2013b](#)), o la densidad en problemas de optimización topológica ([Sigmund, 2007](#)). De esta manera, la conductividad efectiva en el elemento $\Omega^{(e)}$ es

$$\mathbf{k}^{(e)} = \mathbf{k}(\mathbf{p}^{(e)}). \quad (3.8)$$

Además, de la contribución de todos los elementos de la malla, la matriz de conductividad global \mathbf{K} es luego

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}(\mathbf{P}) \quad (3.9)$$

con

$$\mathbf{P} = [\mathbf{p}^{(1)} \ \mathbf{p}^{(2)} \ \dots \ \mathbf{p}^{(E)}]. \quad (3.10)$$

Consecuentemente, al resolver la Ecuación 3.6, la temperatura nodal \mathbf{T} queda en función de \mathbf{P} , y de esta manera lo hace el campo de temperatura T en Ω .

3.1.2. Manipulación de flujo térmico como solución de un problema de optimización

El flujo de calor en el punto $\mathbf{x}^{(q)}$ dentro del elemento finito $\Omega^{(q)}$ viene dado por

$$\mathbf{q}^{(q)} = -\mathbf{k}(\mathbf{p}^{(q)})\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(q)})\mathbf{T}(\mathbf{P}) \equiv \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}). \quad (3.11)$$

Manipular el flujo de calor dentro de Ω significa forzar que el mismo tome valores prescritos $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}$ en una serie de puntos de control $\mathbf{x}^{(q)} \in \Omega$, con $\mathbf{x}^{(q)}$ localizado dentro del elemento finito $\Omega^{(q)}$ y $q = 1, 2, \dots, Q$ (ver Figura 3.1). Para cumplir esta tarea, se debe encontrar \mathbf{P} (que determina toda la distribución de parámetros que caracterizan al material en Ω) tal que

$$\mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) = \bar{\mathbf{q}}^{(q)}, \quad \text{para } q = 1, 2, \dots, Q. \quad (3.12)$$

La búsqueda de \mathbf{P} está restringida a un espacio de diseño admisible \mathcal{D} . En general, no será posible cumplir con la tarea dada utilizando $\mathbf{P} \in \mathcal{D}$, por lo que se intentará hacerlo de la mejor manera posible resolviendo el siguiente problema de optimización no lineal con restricciones:

$$\min_{\mathbf{P} \in \mathcal{D}} f_{\text{obj}}(\mathbf{P}), \quad (3.13)$$

donde f_{obj} es una función objetivo no lineal, la cual mide el error global en el cumplimiento de la tarea en todos los puntos de control. La misma puede definirse como

$$f_{\text{obj}}(\mathbf{P}) = \left[\sum_{q=1}^Q w^{(q)} \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) - \bar{\mathbf{q}}^{(q)} \right\|^2 \right]^{1/2}, \quad (3.14)$$

con $w^{(q)}$ siendo el peso asignado al cumplimiento de la tarea en $\mathbf{x}^{(q)}$, y que satisface $\sum_{q=1}^Q w^{(q)} = 1$. Notar que este es un problema de optimización multi-objetivo tratado con el enfoque de suma ponderada. Además, para $w^{(q)} = 1/Q = \text{constante}$, f_{obj} define la raíz del error cuadrático medio (RMSE) en el cumplimiento de la tarea en todos los puntos de control.

La elección de f_{obj} viene dada por el hecho de elegir una función que mida el error en el cumplimiento de la tarea en las unidades de esa tarea, es decir, en unidades de flujo de calor. La forma elegida podría traer problemas numéricos a la hora de resolver el problema de optimización, ya que si la función objetivo tiende exactamente a cero, cuando se calcula el gradiente de esta función, el mismo podría tender a infinito (en la derivada de f_{obj} con respecto a las variables de diseño aparece un cociente que puede tender a cero). En el caso del presente problema, esto nunca sucede, ya que con el espacio de diseño admisible \mathcal{D} nunca se logra cumplir exacta y simultáneamente $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}$ en todos los puntos de control $\mathbf{x}^{(q)} \in \Omega$.

3.1.3. Definición de metamaterial para conducción anisótropa del calor

Siguiendo a [Narayana y Sato \(2012\)](#), la conductividad efectiva anisótropa en un elemento $\Omega^{(e)}$ puede lograrse utilizando un material compuesto o laminado fabricado con láminas alternadas de material A y B con diferentes conductividades isotrópicas. Como resaltan [Schittny et al. \(2016\)](#), un laminado es un metamaterial ya que su conductividad efectiva, siendo anisótropa, va más allá de las conductividades de sus materiales bases, las cuales son isotrópicas. El uso de laminados formados por materiales de marcada diferencia de conductividad térmica conduce a una evidente anisotropía en la conductividad efectiva, punto importante para la manipulación del flujo térmico. Actualmente, el uso de estos materiales es algo común en la literatura ([Narayana y Sato, 2012](#); [Narayana et al., 2013](#); [Dede et al., 2013b](#); [Vemuri et al., 2014](#); [Bandaru et al., 2015](#); [Chen y Lei, 2015](#)).

Como se ve en la Figura 3.3, el Elemento de Volumen Representativo (RVE) de la microestructura del laminado en un punto $\mathbf{x}^{(e)} \in \Omega^{(e)}$ es un cuadrado unitario caracterizado por el vector $\mathbf{p}^{(e)}$ de componentes $p_1^{(e)} = d_A^{(e)}$ (espesor de la lámina de material A) y $p_2^{(e)} = \theta^{(e)}$ (orientación de las láminas); el espesor de la lámina de material B es $d_B = l_e - d_A$, donde $l_e = 1$ es el espesor del RVE. Las conductividades térmicas efectivas en $\mathbf{x}^{(e)}$ en la dirección de las láminas (λ) y normal a las mismas (τ) son ([Kadic et al., 2013](#))

$$\begin{aligned}\hat{k}_{\lambda\lambda}(\mathbf{x}^{(e)}) &= \frac{d_A^{(e)}k_A + d_B^{(e)}k_B}{l_e} = \tilde{k}_{\lambda\lambda}(d_A^{(e)}), \\ \hat{k}_{\tau\tau}(\mathbf{x}^{(e)}) &= \frac{l_e}{d_A^{(e)}/k_A + d_B^{(e)}/k_B} = \tilde{k}_{\tau\tau}(d_A^{(e)}).\end{aligned}$$

Estas son las conductividades principales, que pueden agruparse en la matriz

$$\tilde{\mathbf{k}}(d_A^{(e)}) = \begin{bmatrix} \tilde{k}_{\lambda\lambda}(d_A^{(e)}) & 0 \\ 0 & \tilde{k}_{\tau\tau}(d_A^{(e)}) \end{bmatrix}.$$

Ahora, la matriz de componentes tensoriales de la conductividad efectiva referida a los ejes fijos Cartesianos $x - y$ en el punto $\mathbf{x}^{(e)}$ puede ser calculada como

$$\hat{\mathbf{k}}(\mathbf{x}^{(e)}) = [\mathbf{R}(\theta^{(e)})]^T \tilde{\mathbf{k}}(d_A^{(e)}) \mathbf{R}(\theta^{(e)}) = \mathbf{k}(\mathbf{p}^{(e)}), \quad (3.15)$$

donde \mathbf{R} es la matriz de rotación

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

La ecuación (3.15) define explícitamente la conductividad efectiva en un punto como función de la microestructura en ese punto. De esta manera, la conductividad térmica del material en cada punto puede ser cuantitativamente caracterizada por el espesor y orientación del laminado en ese punto.

3.2. Metadispositivos para manipulación de flujo de calor

El estudio de metamateriales comenzó con el objetivo de buscar propiedades exóticas que no se hallen en materiales ordinarios de la naturaleza, y continúa hacia la materialización de dispositivos prácticos con determinadas funcionalidades (Tong, 2018). Este es un campo emergente en donde estos dispositivos son diseñados interviniendo sobre la estructura de los mismos a nivel de escala micro (Zheludev y Kivshar, 2012), y las propiedades logradas a escala macro son extraordinarias. En esta Sección se diseñan metadispositivos para manipular el flujo de calor utilizando el concepto de diseño computacional de materiales basado en optimización propuesto en la presente Tesis.

3.2.1. Concentrador de flujo de calor y camuflaje térmico

Se aplica la metodología de optimización propuesta al diseño de un dispositivo para concentrar el calor como una alternativa al diseñado por Chen y Lei (2015) mediante el enfoque de transformación de coordenadas. Este dispositivo, embebido en una placa sometida a un flujo prescrito, se diseña para concentrar la energía térmica en el centro del mismo, mientras que a su vez, se intenta mantener el flujo de calor externo sin alterar. Esta última condición corresponde con camuflaje

térmico. Un observador externo al dispositivo, que cense el flujo de calor por fuera del mismo, al no notar ninguna alteración, no se va a percatar de la presencia del dispositivo concentrador, por lo tanto, se podría afirmar que el dispositivo es invisible al observador (camuflaje).

El dominio Ω corresponde a una placa cuadrada de lados $L_x = L_y = 14$ cm sujeta a las siguientes condiciones de borde: $T = T_{\max} = 100^\circ\text{C}$ para $x = -L_x/2$, $T = T_{\min} = 0^\circ\text{C}$ para $x = L_x/2$, y $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ para $y = \pm L_y/2$ (ver Figura 3.2). El flujo de calor normal a la placa es despreciado, por lo que se asume un problema 2D de transferencia de calor. La placa está hecha de una aleación de acero al 40 % de níquel con conductividad térmica homogénea e isótropa $k_n = 10 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. Sin el dispositivo concentrador, el flujo de calor en la placa es

$$\mathbf{q}_0 = \begin{bmatrix} k_{\text{ns}}(T_{\max} - T_{\min})/L_x \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7.14 \text{ kWm}^{-2} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

El dispositivo considerado es el anillo $\Omega_{\text{libre}} \subset \Omega$ con radio interior $r = 1$ cm y exterior $R = 5$ cm, ver Figura 3.2. Este anillo está diseñado para concentrar térmicamente el flujo de calor en la región Ω_{fjint} . Un requerimiento adicional es que el dispositivo mantenga el flujo de calor externo al mismo (es decir, la porción restante de la placa Ω_{fjext}) inalterado.

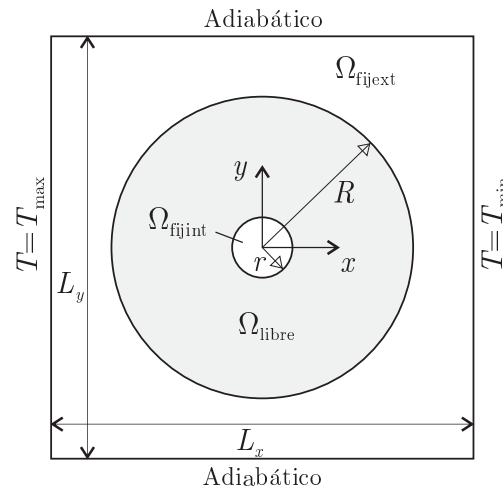


Figura 3.2: Dominio de análisis para el problema de concentración y camuflaje térmico.

El dominio Ω es discretizado utilizando una malla de 70×70 elementos finitos rectangulares bilineales, como se puede apreciar en la Figura 3.3(a). Cada elemento azul, perteneciente al dispositivo Ω_{libre} , tiene un solo punto de muestreo de la microestructura, es decir, en cada elemento finito se tienen dos microparámetros ($d_A^{(e)}$ y $\theta^{(e)}$) que definen las propiedades efectivas en ese elemento (ver Sección 3.1.3). En los demás elementos, el material es acero al níquel. Como materiales que definen el metamaterial (laminado), se adoptan los utilizados por Chen y Lei (2015), es decir, A=cobre y B=polidimetilsiloxano (PDMS), con conductividades isótropas

$$k_{\text{cobre}} = 398 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1} \text{ y } k_{\text{PDMS}} = 0.27 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}.$$

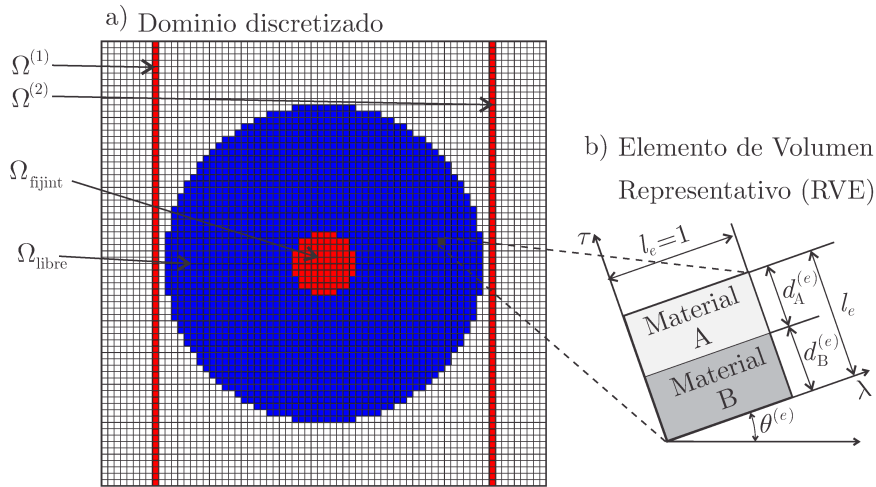


Figura 3.3: (a) Malla de elementos finitos del dominio de análisis Ω ; los elementos azules pertenecen al dispositivo, y los rojos poseen flujo de calor prescrito. (b) Elemento de Volumen Representativo (RVE) que caracteriza la microestructura en un punto $\mathbf{x}^{(\mu)}$ del dispositivo Ω_{libre} .

Respecto al refinamiento de la malla, es importante aclarar ciertos aspectos. En problemas de optimización topológica, la solución óptima para un reticulado con carga en los nodos son infinitas barras que unen esa carga con los apoyos (Michell, 1904). Este concepto, cuando se aplica a los problemas planteados en esta Tesis, señala que la solución óptima es un fractal, es decir, se encuentra en un conjunto distribucional. De esta manera, cualquier método de optimización topológica basado en funciones continuas tiene los problemas de “checkerboard” (o tablero de ajedrez), y de dependencia de los resultados con la malla, que se discuten en detalle en el libro de Bendsøe y Sigmund (2003). Respecto a esto último, en el caso más favorable, cuando se refina una malla debería obtenerse una mejor representación por elementos finitos de la misma estructura, y un mayor nivel de detalle de los contornos de la misma (análisis de convergencia en malla), sin embargo, en el caso de estos problemas, se obtiene una estructura con un mayor nivel de detalle pero completamente diferente. Este fenómeno es resultado de lo explicado anteriormente, ya que el tamaño de malla actúa como un filtrado de la solución, dando más o menos libertad para alcanzar esa solución fractal.

Para obtener soluciones independientes del tamaño de malla, se debe reducir el espacio de soluciones admisibles utilizando algún tipo de restricción, de forma tal de descartar la aparición de estructuras de escala más fina (Bendsøe y Sigmund, 2003). Se puede recurrir así por ejemplo a filtrados de densidad, como el propuesto por Bruns y Tortorelli (2001) y utilizado en esta Tesis, o al control de perímetro, filtrado de sensibilidad, o restricciones en los gradientes (ver el libro de Bendsøe y Sigmund (2003) para más detalles). De esta manera, y teniendo en cuenta lo desarrollado anteriormente, el tamaño de malla que se utiliza es un buen compromiso entre el nivel

de detalle que se considera aceptable para la solución, y el costo computacional del proceso de optimización.

Problema de optimización

Diseñar el presente dispositivo implica resolver el problema de optimización dado por la ecuación (3.13), cuya función objetivo es (3.14). La tarea de camuflaje se prescribe definiendo $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ en cada centro de los elementos en $\Omega^{(1)}$ y $\Omega^{(2)}$. La idea es evitar que el flujo de calor aguas arriba y aguas abajo del dispositivo se vea afectado por la presencia del metamaterial. Sin embargo, hay que aclarar que para cumplir de la mejor forma posible el camuflaje, habría que imponer $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ en todos los elementos fuera del dispositivo (Ω_{fjext}). Cuando a continuación se analicen los resultados del problema de optimización, se podrá comprobar que la forma optada en este ejemplo cumple también muy bien con la condición de camuflaje, por lo que se acepta como válida. Luego, para la tarea de concentración de flujo térmico se define $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = (R/r)\mathbf{q}_0$ en los centros de los elementos en Ω_{fjint} , con $R/r = 5$ en este caso. Notar que el vector \mathbf{P} contiene como variables solo los vectores $\mathbf{p}^{(e)}$ que caracterizan la microestructura en los $N = 1896$ elementos de Ω_{libre} , con $P_{2e-1} = p_1^{(e)} = d_A^{(e)}$ y $P_{2e} = p_2^{(e)} = \theta^{(e)}$, $e = 1, 2, \dots, N$.

Para el metamaterial definido en la Sección 3.1.3, el presente problema de optimización está sujeto a las siguientes restricciones de caja:

$$0 \leq P_{2e-1} = d_A^{(e)} \leq 1, \quad (3.16)$$

$$0 \leq P_{2e} = \theta^{(e)} \leq \pi, \quad \text{con } e = 1, \dots, N. \quad (3.17)$$

Restricciones adicionales pueden servir para evitar “complicaciones” (Bendsøe y Sigmund, 2003) como: dependencia con la malla de elementos finitos (explicado anteriormente), inestabilidades numéricas, no unicidad de la solución, presencia de múltiples mínimos, etc. Sin embargo, para el presente dispositivo, solo restricciones de caja fueron adoptadas.

Como punto inicial del problema de optimización se toma $d_A^{(e)} = 0.25$ y $\theta^{(e)} = 0.25\pi$ en todos los elementos de Ω_{libre} . El punto inicial es muy importante en este tipo de problemas, ya que las soluciones finales dependen mucho del valor que se elija. Si bien en esta Tesis no se demuestra convexidad, estos fenómenos hacen suponer que el problema no es convexo y que posee muchos mínimos locales. Igualmente, si bien las soluciones varían, con tal de que el error en el cumplimiento de la tarea sea aceptable, la solución se considera como válida, es decir, no es imperativo para en el presente caso encontrar la solución con “el mínimo error”, aunque sería excelente poder hacerlo.

Finalmente, el presente problema de optimización no lineal con restricciones es resuelto uti-

lizando el algoritmo de punto interior IPOPT desarrollado por Wächter y Biegler (2006). Es de código abierto y permite resolver problemas con un gran número de variables y restricciones (del orden de los millones). Se caracteriza principalmente por la utilización de métodos de filtrado para las búsquedas lineales (Fletcher y Leyffer, 2002). En el caso de IPOPT, la solución en cada iteración es aceptada si mejora la función objetivo o si lo hace la función de restricción. Hay que tener en cuenta que IPOPT solo intenta buscar un minimizador local del problema, por lo que en problemas no convexos pueden obtenerse diferentes puntos de estancamiento con diferentes valores solución, de forma tal que las diferentes soluciones van a depender de los puntos iniciales de las variables de diseño. Por último, IPOPT necesita información de la primer y segunda derivada de la función objetivo. En este caso, la matriz gradiente de la función objetivo respecto a las variables de diseño se determina analíticamente, y se deja a IPOPT aproximar el Hessiano utilizando un método de quasi-Newton.

Resultados

Las soluciones óptimas para d_A (fracción de cobre ya que el RVE se asumió como un cuadrado unitario) y θ (la orientación de las láminas) en el dispositivo son ploteadas en la Figura 3.4, junto con la correspondiente distribución de temperatura. En este caso, el dispositivo cumple la tarea de concentración y camuflaje con un RMSE igual a $= 1.67 \text{ kWm}^{-2} = 0.23 \|\mathbf{q}_0\|$.

Aunque se considera que este error es suficientemente bajo, la solución posee checkerboard, principalmente en el campo de orientación de las láminas (Figura 3.4 en el centro). Como se explicó anteriormente, este efecto surge porque la formulación continua del problema de optimización trata de representar la solución óptima distribucional (fractal). Esta solución no es interesante o viable desde el punto de vista tecnológico o de fabricación, por lo que se puede recurrir nuevamente a la técnica de filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001), de forma tal de obtener soluciones con una variación continua de microparámetros. Con esta técnica, las componentes del vector \mathbf{P} continúan siendo las variables de diseño del problema de optimización (3.13), pero la función objetivo (3.14) como así también las restricciones (3.16) y (3.17) son evaluadas para el vector de parámetros físicos o filtrados $\tilde{\mathbf{P}} = [\tilde{\mathbf{p}}^{(1)}, \dots, \tilde{\mathbf{p}}^{(N)}]$. Luego, la microestructura en cada elemento finito e en Ω_{libre} está realmente caracterizada por el vector $\tilde{\mathbf{p}}^{(e)}$, el cual es definido como

$$\tilde{\mathbf{p}}^{(e)} = \frac{\sum_i \langle \tilde{r} - \Delta_{ei} \rangle \mathbf{p}^{(i)}}{\sum_i \langle \tilde{r} - \Delta_{ei} \rangle}, \quad (3.18)$$

donde \tilde{r} es el radio de filtrado (a adoptar) medido desde el centro del elemento finito e , $\mathbf{p}^{(i)}$ es el vector de variables de diseño asociado al elemento i , Δ_{ei} es la distancia entre los centros de los elementos e e i , y $\langle x \rangle$ es la función rampa ($\langle x \rangle = x$ para $x > 0$, y $\langle x \rangle = 0$ para $x \leq 0$).

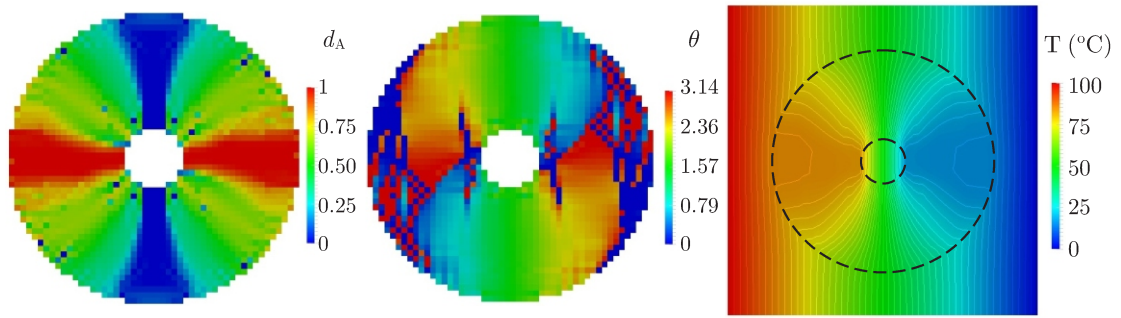


Figura 3.4: Soluciones óptimas sin filtrado de densidad. Distribución de la fracción de cobre (d_A), orientación de las láminas de cobre y PDMS, y temperatura T en el dispositivo concentrador.

Ahora, se resuelve el problema de optimización (3.13) utilizando el filtrado de densidad con $\tilde{r} = 1$ cm (i.e., cinco veces el tamaño de un elemento finito de la malla), y se obtiene la distribución del metamaterial de la Figura 3.5, la cual está completamente libre de checkerboard. El dispositivo así obtenido Ω_{libre} tiene una estructura en forma de cruz, con brazos horizontales (paralelos a \mathbf{q}_0) mayoritariamente de cobre de alta conductividad, y brazos verticales (normal a \mathbf{q}_0) mayoritariamente de material poco conductor (PDMS).

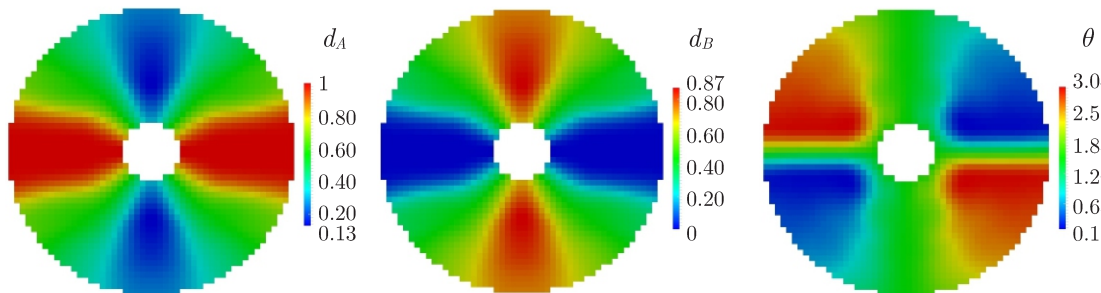


Figura 3.5: Soluciones óptimas utilizando filtrado de densidad. Distribución de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PDMS (d_B), y orientación de las láminas de cobre y PDMS en el dispositivo concentrador.

Como consecuencia de la distribución del metamaterial graficado en la Figura 3.5, la conductividad térmica efectiva varía dentro del dispositivo como se muestra en la Figura 3.6, siendo generalmente anisótropa. Gracias a esta distribución de conductividad, el campo de temperatura en toda la placa es el mostrado en la Figura 3.7(a). Allí, se puede evidenciar cualitativamente cuan bien las tareas combinadas de camuflaje y concentración son logradas: primero, las isoterms son casi paralelas e igualmente espaciadas fuera del dispositivo, como si no estuviera el mismo. Segundo, dentro del dispositivo, las isoterms son claramente comprimidas hacia la región interna (Ω_{fijint}), demostrando una marcada concentración de energía. Esto puede ser cuantitativamente apreciado en la Figura 3.7(b): la temperatura a lo largo de la línea central $y = 0$, donde el flujo de calor es más alterado por el dispositivo, está levemente modificada por fuera del mismo (camuflaje), mientras que el gradiente en el centro es 4.58 veces más grande que el original. Es importante remarcar que, como solución del problema de optimización, la tarea combinada de

camuflaje y concentración fue lograda con un RMSE igual a $2.04 \text{ kWm}^{-2} = 0.29 \|\mathbf{q}_0\|$ (mayor que la solución con checkerboard); individualmente, el RMSE para la tarea de concentración en Ω_{fijint} es $3.34 \text{ kWm}^{-2} = 0.09(R/r)\|\mathbf{q}_0\|$, mientras que para la de camuflaje en $\Omega^{(1)}$ y $\Omega^{(2)}$ es igual a $0.39 \text{ kWm}^{-2} = 0.05\|\mathbf{q}_0\|$. Aunque el problema de minimización (3.13) considera solo las porciones $\Omega^{(1)}$ y $\Omega^{(2)}$ de Ω_{fijext} , el flujo de calor está prácticamente inalterado alrededor de Ω_{fijext} : el mismo se aproxima a \mathbf{q}_0 con un RMSE igual a $0.07\|\mathbf{q}_0\|$.

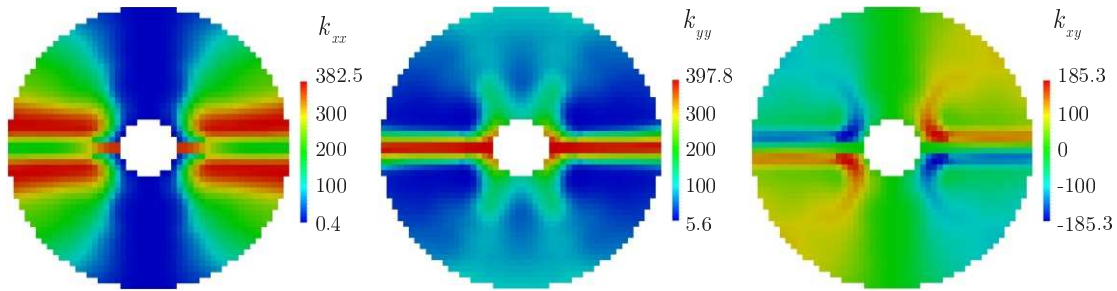


Figura 3.6: Distribución de las componentes Cartesianas de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo concentrador, dadas en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

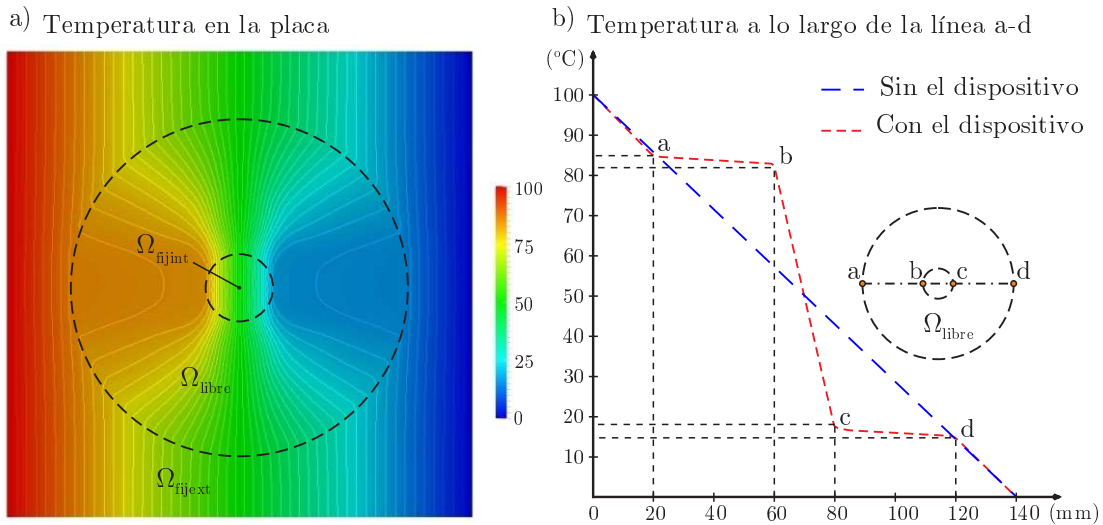


Figura 3.7: (a) Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$; la diferencia entre isotermas es 2°C . (b) Perfil de temperatura a lo largo de a-d.

Chen y Lei (2015) definieron un índice para medir la eficiencia de la concentración como $f = |(T_b - T_c)/(T_a - T_d)| \times 100$, donde b y c son puntos localizados en la frontera de la región de concentración de calor Ω_{fijint} , y a y d son puntos localizados en la frontera externa del dispositivo Ω_{libre} (ver Figura 3.7(b)). Para el presente dispositivo, su valor es $f = 94.2\%$, cercano al ideal $f = 100\%$. Es importante remarcar, que el dispositivo diseñado por Chen y Lei (2015) basado en el enfoque de transformación de coordenadas está hecho de 100 láminas radiales de cobre-PDMS, y tiene una eficiencia teórica $f = 96.3\%$, la cual cae a $f = 88.1\%$ para el dispositivo finalmente fabricado.

Comparando el presente dispositivo con el de [Chen y Lei \(2015\)](#), aparece una ventaja crucial de la presente metodología basada en optimización con respecto al diseño por transformación de coordenadas: el dispositivo es diseñado solo para la tarea deseada (manipular un flujo de calor que originalmente es unidireccional), evitando así un “sobredimensionamiento” del mismo al realizar tareas no deseadas o no prescritas (en el caso del dispositivo de [Chen y Lei \(2015\)](#), manipular el flujo de calor proveniente de cualquier dirección). Más aún, si la tarea es solo concentrar el flujo térmico, el camuflaje es un efecto colateral, resultado de aplicar la metodología de transformación de coordenadas.

Es interesante aclarar que el presente dispositivo puede verse como una inclusión neutral debido a su efecto camuflador. El concepto de inclusiones neutrales se basa en la introducción de una esfera recubierta de un cierto material en un medio isótropo, de forma tal que no distorsione el campo físico al cual está sometido ese medio. Haciendo una analogía con el dispositivo diseñado en esta Sección, la introducción del mismo no debería afectar el campo de temperatura en el dominio Ω_{fjext} . De esta forma, si se aplica el concepto de inclusiones neutrales (ver capítulo 7 del libro de [Milton \(2004\)](#) y las referencias citadas), puede ser posible determinar en forma analítica un material homogéneo e isótropo para realizar un dispositivo camuflador, solución mucho más conveniente que el uso de un metamaterial heterogéneo, ya que evidentemente facilita la fabricación del dispositivo. Sin embargo, esta solución trivial no es aplicable al presente caso. En realidad, aplicando la fórmula de [Hashin y Shtrikman \(1962\)](#), con las regiones externa (Ω_{fjext}) e interna (Ω_{fjint}) del dispositivo con conductividad isótropa k_{ns} , se determina que la única forma de mantener el campo de temperatura exterior inalterado es que el dispositivo posea como conductividad isótropa el mismo valor k_{ns} , lo que conlleva completamente a ignorar la tarea de concentración, objetivo principal del dispositivo diseñado.

La presente metodología permite el diseño de dispositivos manipuladores de flujo de calor considerando solamente régimen estacionario. En el Capítulo 5 se extiende la misma a problemas de transferencia térmica teniendo en cuenta también régimen transitorio, de forma tal de obtener una metodología general como la propuesta por [Guenneau et al. \(2012\)](#) basada en transformación de coordenadas.

Costo computacional

Para mostrar que la metodología propuesta no insume un costo computacional considerable, se analizan los tiempos de las diferentes etapas del diseño computacional del presente metadispositivo para concentrar y camuflar el flujo de calor. En lo que concierne al pre-proceso, que consiste en la definición del dominio, materiales, malla de elementos finitos, condiciones de borde, tarea de

manipulación de flujo térmico, etc., el tiempo consumido es 0.18 segundos. Luego, la resolución del problema de optimización propiamente dicho consume 182.4 segundos. En este problema se logra la convergencia a partir de la iteración número 600 aproximadamente, pero IPOPT finaliza el proceso en la iteración 1000 (máxima cantidad de iteraciones). Por último, el tiempo para la impresión de resultados en Paraview (Ahrens et al., 2005) es de 1.6 segundos. En total, todo el proceso dura aproximadamente 3 minutos, corriendo en una PC de escritorio (Intel Core i7-4790K de 4.00 GHz y 32 GB de ram).

3.2.2. Camuflaje y bloqueo térmico

Un dispositivo para camuflaje y bloqueo térmico se diseña mediante la presente metodología, como alternativa al dispositivo de Schittny et al. (2013) basado en transformación de coordenadas. Este dispositivo, insertado en una placa sujeta a un flujo de calor prescrito, se diseña para bloquear el flujo de calor en la región que encierra y para mantenerlo inalterado por fuera del mismo.

El dominio Ω es una placa rectangular de lados $W = 18$ cm y $H = 12$ cm sujeta a las siguientes condiciones de borde: $T = T_{\max} = 80^\circ\text{C}$ para $x = -W/2$, $T = T_{\min} = 25^\circ\text{C}$ para $x = W/2$, y $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ para $y = \pm H/2$ (ver Figura 3.8). Nuevamente el flujo de calor normal a la placa es despreciado, por lo que se asume un problema 2D de transferencia de calor. La placa está hecha de un material homogéneo e isótropo con conductividad térmica $k_0 = 85 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, por lo que sin el dispositivo, el flujo de calor es

$$\mathbf{q}_0 = \begin{bmatrix} k_0(T_{\max} - T_{\min})/W \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 26.0 \text{ kWm}^{-2} \\ 0 \end{bmatrix}.$$

El dispositivo manipulador de flujo térmico es el anillo $\Omega_{\text{libre}} \subset \Omega$ con radio interno $r = 2.5$ cm y externo $R = 5$ cm, ver Figura 3.8. Este anillo se diseña para bloquear térmicamente la región Ω_{fijint} , hecha de cobre con conductividad isótropa $k_{\text{cobre}} = 394 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. Además, un requerimiento extra del dispositivo es mantener el flujo de calor externo sin alterar, es decir, en la región Ω_{fijext} .

El dominio Ω se discretiza utilizando una malla de 75×50 elementos finitos cuadrados bilineales, como se observa en la Figura 3.9. Cada elemento azul, perteneciente al dispositivo Ω_{libre} , tiene un punto de muestreo de la microestructura variable, es decir, en cada elemento finito se tienen dos microparámetros ($d_A^{(e)}$ y $\theta^{(e)}$) que definen las propiedades efectivas en ese elemento (ver Sección 3.1.3). En los demás elementos, el material está fijado. Como materiales que definen el metamaterial (laminado), se adoptan los utilizados por Schittny et al. (2013), es decir, A=cobre y B=polidimetilsiloxano (PDMS), con conductividades isótropas $k_{\text{cobre}} = 394 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ y

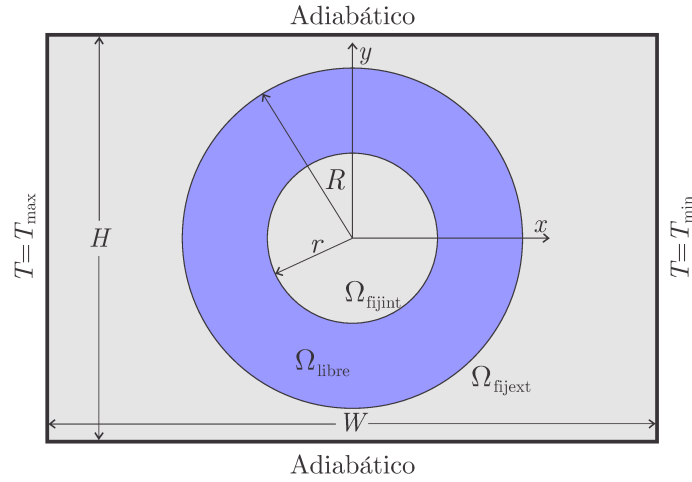


Figura 3.8: Dominio de análisis para el problema de camuflaje y bloqueo térmico.

$$k_{\text{PDMS}} = 0.15 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}.$$

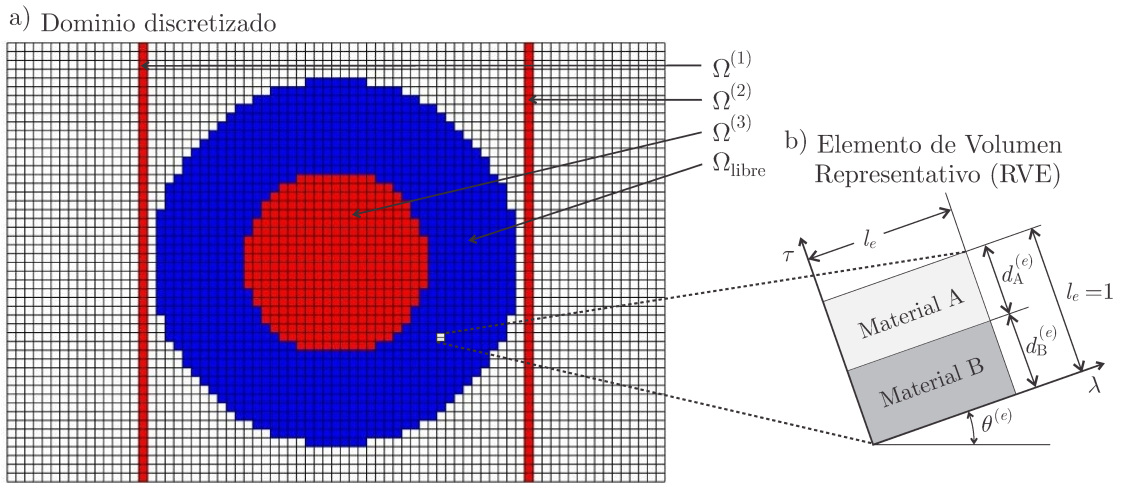


Figura 3.9: (a) Malla de elementos finitos del dominio de análisis Ω ; los elementos azules pertenecen al dispositivo manipulador de flujo térmico Ω_{libre} , y los rojos poseen flujo de calor prescrito. (b) Elemento de Volumen Representativo (RVE) de la microestructura en un elemento perteneciente al dispositivo.

Problema de optimización

Diseñar el presente dispositivo implica resolver el problema de optimización dado por la Ecuación (3.13), cuya función objetivo es 3.14. La sumatoria en esa ecuación se extiende a los $Q = 444$ elementos rojos de la Figura 3.9, aquellos en $\Omega^{(1)} \subset \Omega_{\text{fijext}}$, $\Omega^{(2)} \subset \Omega_{\text{fijext}}$ y Ω_{fijint} . La tarea de camuflaje se prescribe definiendo $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ en el centro de los elementos en $\Omega^{(1)}$ y $\Omega^{(2)}$. La idea nuevamente es que el flujo de calor se mantenga inalterado aguas abajo y arriba del dispositivo. Luego, la tarea de bloqueo térmico se realiza con $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{0}$ en los centros de los elementos en Ω_{fijint} .

Una vez más el vector de variables de diseño \mathbf{P} es el conjunto de vectores $\mathbf{p}^{(e)}$ caracterizando la microestructura en los $N = 1014$ elementos de Ω_{libre} , con $P_{2e-1} = p_1^{(e)} = d_A^{(e)}$ y $P_{2e} = p_2^{(e)} =$

$\theta^{(e)}$, $e = 1, 2, \dots, N$. Para el metamaterial definido en la Sección 3.1.3, el presente problema de optimización está sujeto a las siguientes restricciones de caja:

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

Como punto inicial se toma $d_A^{(e)} = 0.5$ y $\theta^{(e)} = 0.5\pi$ en todos los elementos de Ω_{libre} . El problema de optimización no lineal con restricciones se resuelve con IPOPT (Wächter y Biegler, 2006), y para no obtener soluciones con checkerboard, se utiliza filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001), con un radio de filtrado $\tilde{r} = 1.2$ cm (cinco veces el tamaño de un elemento finito).

Resultados

Las soluciones óptimas para d_A (fracción de cobre), d_B (fracción de PDMS) y θ (orientación de las láminas) en el dispositivo son ploteadas en la Figura 3.10. La fracción de cobre se incrementa radialmente en todo el anillo, y lo hace también en el dispositivo de Schittny et al. (2013) (ver Figura 3.11), pero de una forma concéntrica.

La Figura 3.12 muestra el campo de conductividad efectiva en el dispositivo Ω_{libre} , generalmente anisótropa, como resultado de la distribución óptima del metamaterial. Para esta distribución de conductividades, el campo de temperatura resultante es el mostrado en la Figura 3.13. Allí puede verse que la tarea de camuflaje fue muy bien lograda, ya que las isotermas fuera del dispositivo son mayoritariamente verticales y separadas uniformemente. A su vez, la tarea de bloqueo se llevo a cabo eficientemente, ya que el rango de temperaturas entre las dos isotermas dentro del dispositivo no es mayor que 1°C (bajo gradiente térmico). Cuantitativamente, el RMSE en el cumplimiento de ambas tareas es $107.4 \text{ Wm}^{-2} = 4.18 \times 10^{-3} \|\mathbf{q}_0\|$, el cual se considera muy satisfactorio.

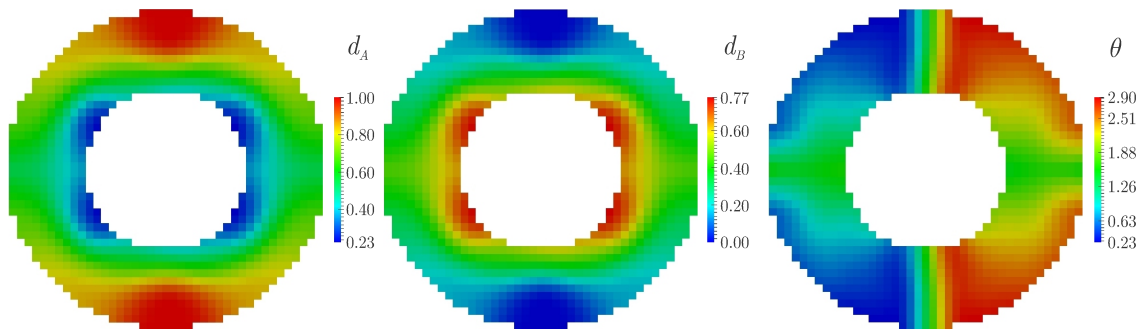


Figura 3.10: Variación de la fracción de cobre (d_A), de la de PDMS (d_B), y de la orientación de las láminas de cobre-PDMS del dispositivo bloqueador-camuflador.

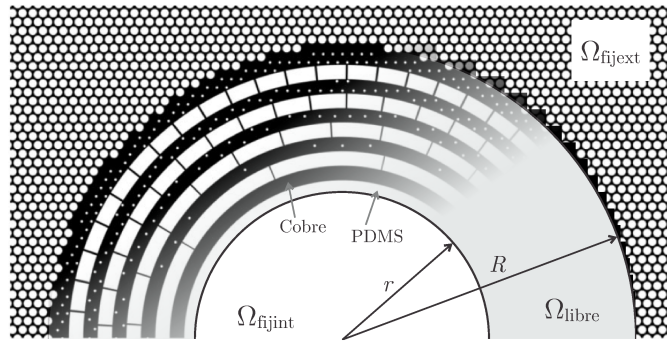


Figura 3.11: Placa de cobre perforada del experimento de bloqueo-camuflaje propuesto por Schittny et al. (2013) (imagen adaptada).

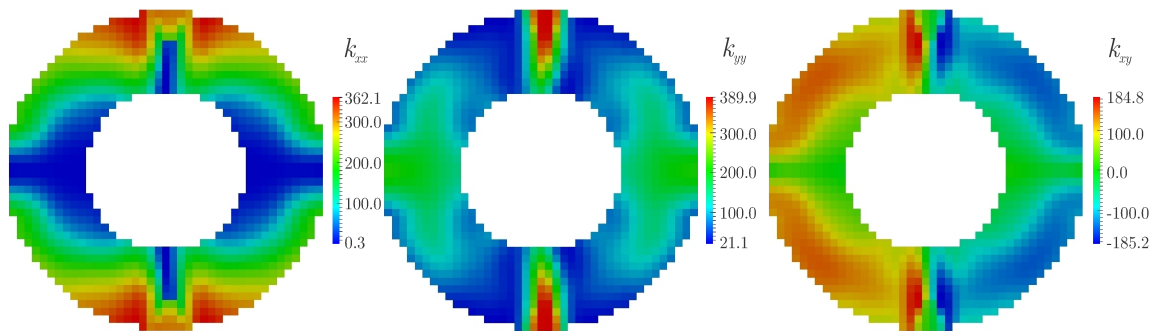


Figura 3.12: Componentes cartesianas de la conductividad térmica efectiva del dispositivo bloqueador-camuflador, en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

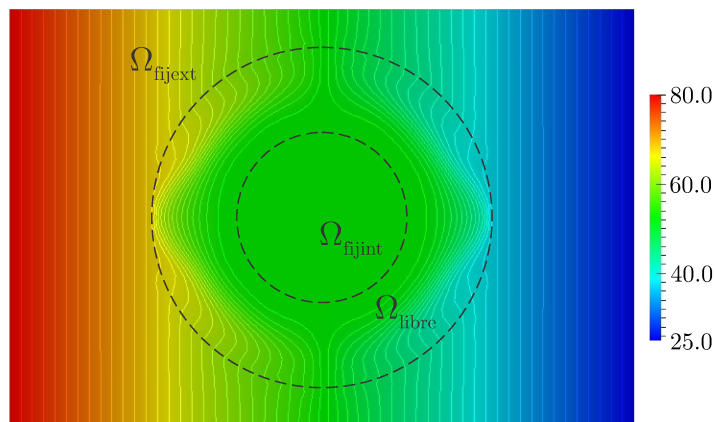


Figura 3.13: Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$. La diferencia entre isotermae es 1°C .

3.2.3. Inversor de flujo de calor y camuflaje térmico

Se diseña un dispositivo para inversión y camuflaje de flujo de calor, como alternativa al dispositivo propuesto por Narayana y Sato (2012), los cuales fueron los primeros en determinar la distribución requerida de conductividad anisótropa para rotar el flujo de calor, resultado de aplicar la metodología de transformación de coordenadas utilizada por Chen y Chan (2007b) para rotar ondas electromagnéticas. Lograron aproximar tal distribución utilizando un metamaterial formado por láminas alternadas de cobre y poliuretano, las cuales eran distribuidas en forma de espiral, haciendo que el flujo de calor que ingresaba al dispositivo comenzara a rotar hasta lograr la inversión

completa del mismo en la zona encerrada por el dispositivo.

El dominio Ω (Figura 3.14) define la región en donde el flujo de calor debe ser manipulado, e intenta imitar el dispositivo de Narayana y Sato (2012). En este caso, el mismo es una placa rectangular con lados $L_x = 9$ cm y $L_y = 18$ cm, sujeta a las siguientes condiciones de borde: $T = T_{\max} = 321.85$ K para $x = -L_x/2$, $T = T_{\min} = 283.15$ K para $x = L_x/2$, y $\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = 0$ para $y = \pm L_y/2$. Nuevamente no se considera el flujo de calor perpendicular al dominio de análisis. De esta manera, la placa original está sometida a un gradiente de temperaturas homogéneo con magnitud 430 K m^{-1} y dirección $-x$, idéntico al encontrado en el problema de inversión y camuflaje térmico de Narayana y Sato (2012). Además, si se considera que la placa está formada por agua de agar, con conductividad $k_{\text{agar}} = 0.57$ $\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$, el flujo de calor en la misma es el dado por el vector \mathbf{q}_0 con magnitud $q_0 = 245.10$ W m^{-2} y dirección x .

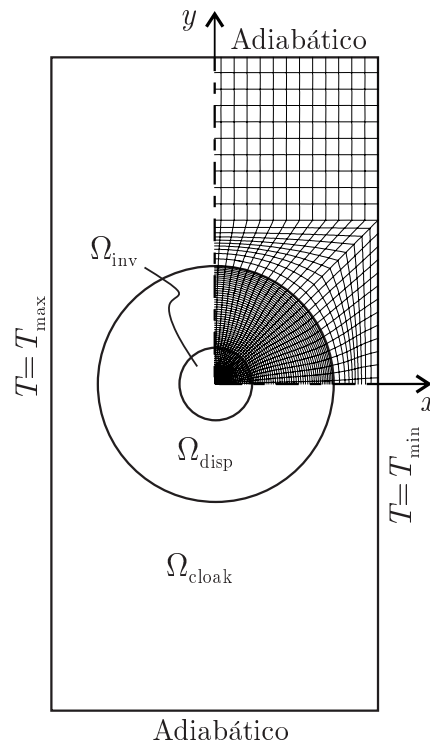


Figura 3.14: Dominio Ω , unión de la región Ω_{disp} ocupada por el dispositivo, la región Ω_{inv} de inversión de flujo, y la región Ω_{cloak} donde no debe alterarse el flujo de calor.

El dispositivo que ocupa la región Ω_{disp} (un anillo centrado con diámetro interior $d_{\text{int}} = 2$ cm y exterior $d_{\text{ext}} = 6.5$ cm) se diseña para invertir el flujo de calor en Ω_{inv} (dentro del dispositivo) y para mantener el flujo térmico sin alteraciones en Ω_{cloak} (fuera del dispositivo). La Figura 3.14 muestra el dominio $\Omega = \Omega_{\text{disp}} \cup \Omega_{\text{cloak}} \cup \Omega_{\text{inv}}$, las condiciones de borde, y un cuarto de la malla de elementos finitos para Ω , la cual es simétrica con respecto a los ejes x e y . Toda la malla está hecha de 7625 elementos finitos bilineales, los cuales están distribuidos de la siguiente manera: $N_{\text{disp}} = 4000$ elementos en Ω_{disp} , $N_{\text{inv}} = 2125$ elementos en Ω_{inv} , y $N_{\text{cloak}} = 1500$ elementos

en Ω_{cloak} .

En el caso del presente dispositivo, se utilizará cobre y polimetacrilato de metilo (PMMA) como materiales para el laminado (metamaterial), cuyas conductividades son $k_{\text{cobre}} = 403 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $k_{\text{PMMA}} = 0.22 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, respectivamente. Todos los materiales involucrados en este ejemplo, tanto en el dispositivo como en la placa, tienen las mismas propiedades encontradas en el trabajo de Narayana y Sato (2012), de forma tal que puedan ser comparados.

Problema de optimización

El dispositivo de inversión y camuflaje térmico se diseña planteando el problema de minimización definido por la Ecuación (3.13), cuya función objetivo está dada por (3.14), en donde $\mathbf{q}^{(q)} = -\mathbf{q}_0$ se prescribe en todos los elementos en $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{inv}}$ (inversión de flujo de calor), y $\mathbf{q}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ (camuflaje térmico) en todos los elementos en $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{cloak}}$. A diferencia de los ejemplos de las Secciones 3.2.1 y 3.2.2, en este caso sí se impone camuflaje en todos los elementos por fuera del dispositivo. El motivo del cambio se debe a que a medida que se fue avanzando en el diseño de dispositivos manipuladores, especialmente aquellos cuya tarea de manipulación de flujo es extrema (inversión de calor, como lo es el presente ejemplo), la tarea de camuflaje costaba mucho más poder lograrla de la manera en la que se la venía imponiendo, es decir, que el flujo aguas arriba sea igual aguas abajo. Es por ello que en este caso se pensó en imponer en todo el dominio externo al dispositivo la condición de camuflaje. En definitiva, esta es realmente la forma correcta de imponer esta tarea, pero en los primeros dispositivos diseñados la forma original de fijarla permitía obtener buenos resultados. Por último, $w^{(q)} = 1/Q = 2.7586 \times 10^{-4}$ (con $Q = N_{\text{inv}} + N_{\text{cloak}} = 2125 + 1500 = 3625$) se asume constante. De esta manera se obtiene la siguiente función objetivo:

$$f_{\text{obj}}(\mathbf{P}) = \left[\frac{1}{Q} \left(\sum_{q|\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{inv}}} \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) + \mathbf{q}_0 \right\|^2 + \sum_{q|\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{cloak}}} \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) - \mathbf{q}_0 \right\|^2 \right) \right]^{1/2}. \quad (3.19)$$

Esta representa el RMSE en el cumplimiento de la tarea de inversión en todos los elementos en Ω_{inv} combinada con la de camuflaje en todos los elementos en Ω_{cloak} . Las variables de diseño agrupadas en \mathbf{P} son el conjunto de vectores $\mathbf{p}^{(e)}$ caracterizando la microestructura en los $N = 4000$ elementos de Ω_{dev} , con $P_{2e-1} = p_1^{(e)} = d_A^{(e)}$ y $P_{2e} = p_2^{(e)} = \theta^{(e)}$, $e = 1, 2, \dots, N$. Para el metamaterial definido en la Sección 3.1.3, el presente problema de optimización está sujeto a las

siguientes restricciones de caja:

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

A su vez, el problema de optimización no lineal con restricciones se resuelve con IPOPT (Wächter y Biegler, 2006), y para no obtener checkerboard, se utiliza filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001), con un radio de filtrado $\tilde{r} = 3.5$ mm (cuatro veces el tamaño promedio de un elemento en Ω_{disp}). Como punto inicial del problema de optimización se toma $d_A^{(e)} = 0.5$ y $\theta^{(e)} = 0.5\pi$.

La solución del problema es el vector de variables de diseño \mathbf{P} que define la distribución de metamaterial en el dispositivo. Tal dispositivo es un anillo que produce la inversión de flujo en la región que encierra, mientras que mantiene inalterado el flujo exterior. Ambas tareas se cumplen, si no es exactamente, con un mínimo RMSE.

Resultados

Las soluciones para d_A , d_B y θ en el dispositivo son ploteadas en la Figura 3.15. La fracción de cobre con los mayores valores forma dos espirales, lo que junto con la orientación de las láminas, genera un camino de alta conductividad térmica, el cual facilita la inversión del flujo de calor en la zona central del dispositivo. Este último se diferencia notablemente del dispositivo de Narayana y Sato (2012), el cual posee 96 espirales de material compuesto que permiten rotar el flujo térmico en su zona central. Esta característica se debe a que el método de transformación de coordenadas permite obtener un dispositivo para invertir un flujo de calor proveniente de todas las direcciones, y el presente solo se diseña para un flujo unidimensional. En este punto se puede ver una ventaja de la metodología propuesta, en donde el dispositivo se diseña solamente para la tarea de manipulación de flujo térmico deseada.

La Figura 3.16 muestra el campo de conductividad efectiva en el dispositivo Ω_{disp} , generalmente anisótropa, como resultado de la distribución óptima del metamaterial. Para esta distribución de conductividades, el campo de temperatura resultante es el mostrado en la Figura 3.17. Allí puede verse que la tarea de inversión fue muy bien lograda, ya que las isoterms son rotadas en el centro del dispositivo. Respecto a la tarea de camuflaje, si bien mayoritariamente las isoterms fuera del dispositivo son verticales y equiespaciadas, se produce una compresión de las mismas en los laterales del dispositivo (en la zona correspondiente al eje x del dominio Ω), por lo que no se podría afirmar que el camuflaje se cumple eficientemente en todo el dominio. Cuantitativamente hablando, el RMSE en el cumplimiento de ambas tareas es $32.28 \text{ Wm}^{-2} = 0.13 \|\mathbf{q}_0\|$. Sin embargo, si se desglosan ambas tareas, el RMSE para camuflaje es $43.80 \text{ Wm}^{-2} = 0.18 \|\mathbf{q}_0\|$, y

para inversión, $20.59 \text{ Wm}^{-2} = 0.08 \|\mathbf{q}_0\|$, lo que confirma que la tarea de camuflaje no se cumple tan eficientemente en todo el dominio Ω_{cloak} , en comparación con la tarea de inversión en Ω_{inv} . El bajo error en la tarea de inversión comprueba el buen cumplimiento de la misma. La diferencia entre ambos errores puede explicarse por el hecho de que la tarea de camuflaje está impuesta en un número menor de elementos finitos ($N_{\text{cloak}} = 1500$), por lo que globalmente aporta menos a satisfacer la función objetivo si se la compara con la tarea de inversión ($N_{\text{inv}} = 2125$), es decir, tiene menor peso. Una forma de solucionar esto podría ser el aumento de los pesos individuales de la tarea de camuflaje, lo que se logra incrementando $w^{(q)}$ para los elementos $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{cloak}}$.

Por último, si se calcula numéricamente el flujo de calor en el centro del dispositivo de Narayana y Sato (2012), el mismo es igual a $\mathbf{q}^{(c)} = -0.56q_0[\cos 24^\circ \sin 24^\circ]^T$, mientras que en el presente dispositivo diseñado por optimización es $\mathbf{q}^{(c)} = -0.94q_0[\cos(-2.18^\circ) \sin(-2.18^\circ)]^T$.

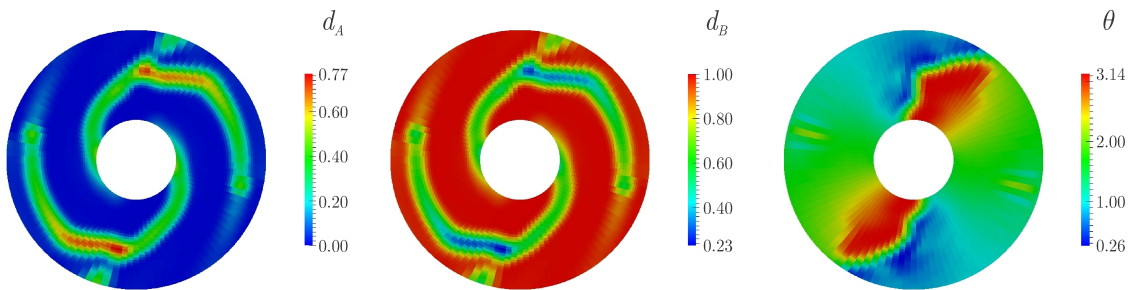


Figura 3.15: Soluciones óptimas (con filtrado de densidad). Distribución de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PMMA (d_B), y orientación de las láminas de cobre y PMMA en el dispositivo inversor.

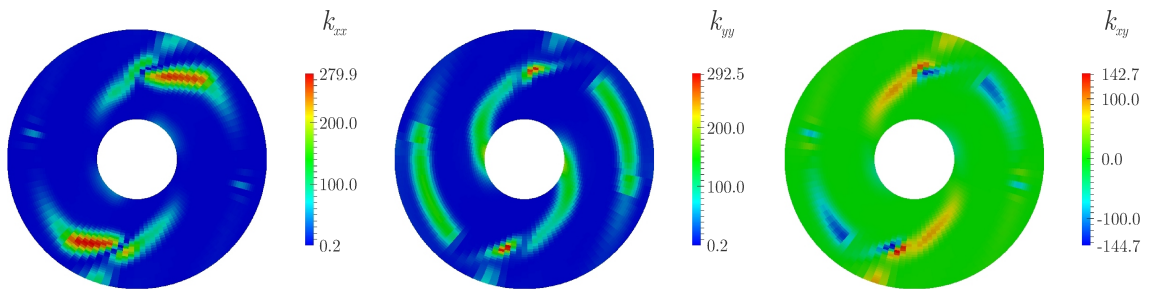


Figura 3.16: Distribución de las componentes Cartesianas de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo inversor, dadas en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

En los resultados de la Figura 3.15 puede verse que la distribución de microparámetros tiende a formar una simetría polar. Si bien no se cumple exactamente, hay una cierta tendencia a lograrla. Es por ello que se resuelve nuevamente el problema de inversión, pero esta vez se fuerza la existencia de esta simetría. Las Figuras 3.18, 3.19 y 3.20 muestran la distribución de microparámetros, el campo de conductividad anisótropa en el dispositivo, y la distribución de temperatura resultante, respectivamente. Puede verse claramente la simetría polar y que el dispositivo invierte el flujo de calor eficientemente. También se observa un cambio en algunos valores, en especial del máximo valor de d_A y consecuentemente del mínimo de d_B . Esto produce una mo-

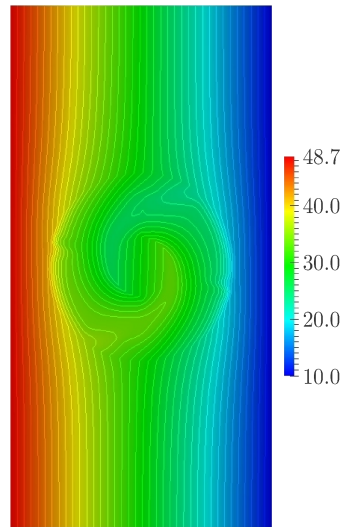


Figura 3.17: Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$; la diferencia entre isotermas es 0.9923°C .

dificación en el campo de conductividad anisótropa. Cuantitativamente, el RMSE en el cumplimiento de ambas tareas es $34.41 \text{ Wm}^{-2} = 0.14\|\mathbf{q}_0\|$, el cual aumenta muy poco al introducir esta restricción de simetría. Individualmente, el RMSE para camuflaje es $45.83 \text{ Wm}^{-2} = 0.19\|\mathbf{q}_0\|$, y para inversión, $23.18 \text{ Wm}^{-2} = 0.09\|\mathbf{q}_0\|$. Puede verse que la tarea de camuflaje sigue sin cumplirse completamente en todo Ω_{cloak} , y que la de inversión empeora un poco, pero sin afectar la inversión de flujo térmico. Por último, el flujo de calor en el centro del dispositivo es $\mathbf{q}^{(c)} = -0.93q_0[\cos(-2.54^{\circ}) \sin(-2.54^{\circ})]^T$.

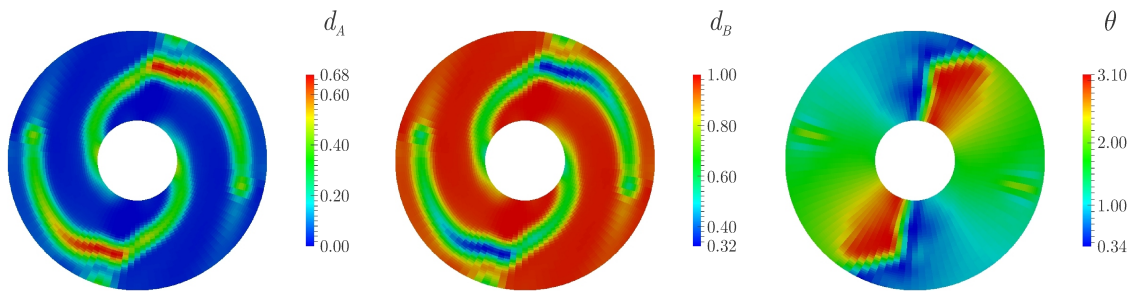


Figura 3.18: Soluciones óptimas (con filtrado de densidad y restricción de simetría). Distribución de la fracción de cobre (d_A), de la fracción de PMMA (d_B), y orientación de las láminas de cobre y PMMA en el dispositivo inversor.

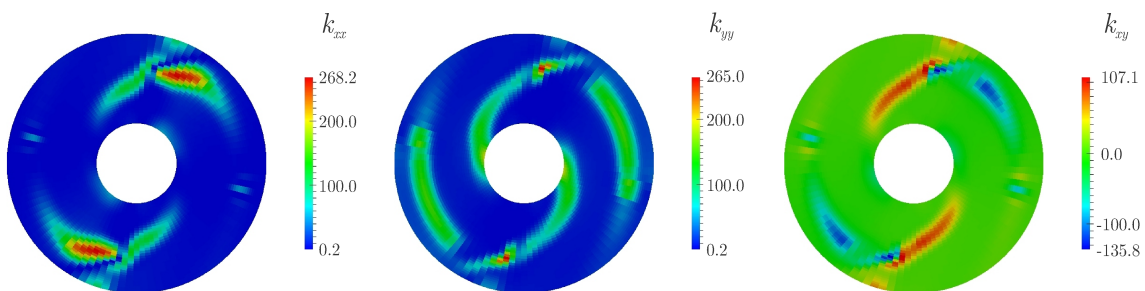


Figura 3.19: Distribución de las componentes Cartesianas de la conductividad térmica efectiva en el dispositivo inversor, dadas en $\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

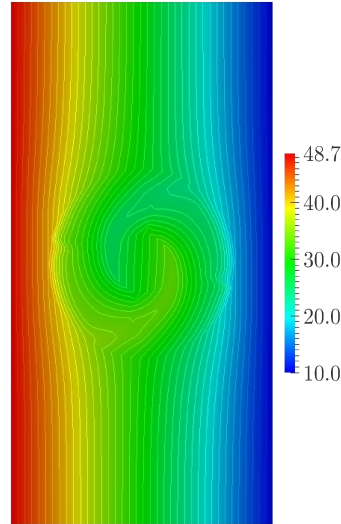


Figura 3.20: Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$; la diferencia entre isotermas es 0.9923°C .

Para finalizar, se intenta mejorar la tarea de camuflaje del dispositivo inversor en el dominio Ω_{cloak} . Para ello, se incrementa el peso que se le da a la tarea de camuflaje y se reduce el de la tarea de inversión, es decir, se adopta $w^{(q)} = 6.115 \times 10^{-4}$ para todos los elementos $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{cloak}}$, y $w^{(q)} = 3.895 \times 10^{-5}$ para $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{inv}}$. La elección de estos valores se hace por prueba y error, analizando las soluciones obtenidas y si se cumple con un mínimo error la tarea impuesta. Las Figuras 3.21a-b y 3.21c muestran la distribución de microparámetros en el dispositivo y la distribución de temperatura resultante, respectivamente. Puede verse como mejora la tarea de camuflaje, ya que no hay una compresión apreciable de las isotermas en los laterales del dispositivo, y en su gran mayoría se mantienen sin alteración en el dominio Ω_{cloak} . Respecto a la tarea de inversión, se puede observar como el flujo de calor no es invertido en su totalidad, ya que las isotermas no son completamente verticales en el centro del dispositivo. Estos resultados pueden explicarse cuantitativamente analizando el error de las distintas tareas. El error global de concentración e inversión es $25.06 \text{ Wm}^{-2} = 0.10 \|\mathbf{q}_0\|$, el cual interesantemente disminuyó, por lo que se lo considera satisfactorio. Individualmente, el error para camuflaje es $19.88 \text{ Wm}^{-2} = 0.08 \|\mathbf{q}_0\|$, y para inversión, $28.15 \text{ Wm}^{-2} = 0.11 \|\mathbf{q}_0\|$. El primero disminuyó más del 56 % en comparación con el del dispositivo anterior en donde se consideraba simetría, y el segundo puede verse que aumentó en un 21 %, lo que explica la mejora en la tarea de camuflaje y el deterioro de la inversión. Esta última tiene como consecuencia un flujo de calor en el centro del dispositivo igual a $\mathbf{q}^{(c)} = -0.74q_0[\cos(-9.10^{\circ}) \sin(-9.10^{\circ})]^T$. Como en este ejemplo se le dio más peso a la tarea de inversión, y esta mejoró considerablemente, se puede explicar la mejora de la tarea global de inversión y camuflaje.

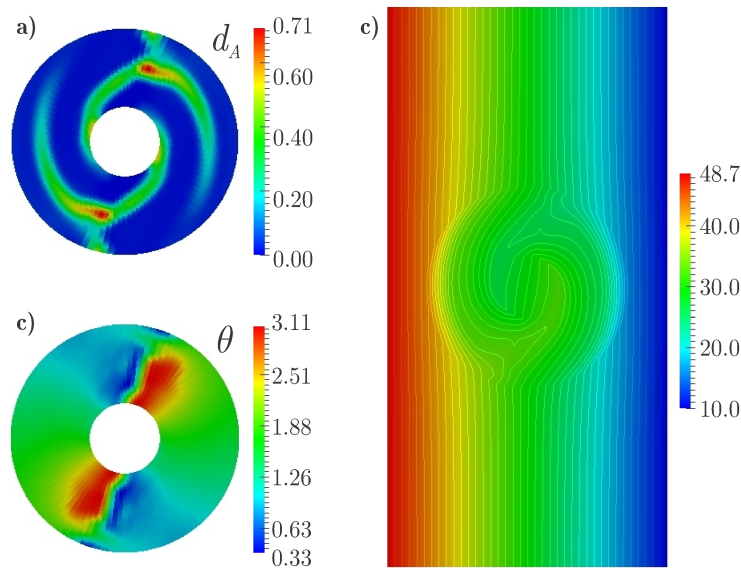


Figura 3.21: Soluciones óptimas con filtrado de densidad y restricción de simetría. a) Distribución de la fracción de cobre (d_A). b) Orientación de las láminas de cobre y PMMA. c) Distribución de temperatura en la placa, en $^{\circ}\text{C}$; la diferencia entre isotermas es 0.9923°C .

3.3. Fabricabilidad en el diseño de materiales térmicos

Uno de los obstáculos para el uso práctico de metamateriales térmicos es la dificultad de fabricación de los dispositivos, principalmente debido a que necesitan de una precisa variación espacial del metamaterial dentro de los mismos. Para resolver esta dificultad, [Vemuri et al. \(2014\)](#) proponen fabricar dispositivos manipuladores de flujo térmico utilizando un laminado homogéneo que está ordenado en diferentes orientaciones en el dispositivo propuesto. De esta manera, los autores aproximan lo mejor posible la distribución de conductividad térmica requerida para la tarea deseada, y logran dispositivos para concentrar o bloquear el flujo térmico de más fácil fabricación.

Coincidiendo con [Vemuri et al. \(2014\)](#), se considera que esta discretización de la distribución espacial del metamaterial es la mejor forma de facilitar la fabricación de metadispositivos. Así, se puede determinar la geometría de los subdominios homogéneos resultantes como solución del problema de minimizar el error en el cumplimiento de la tarea. Si por ejemplo, el material en cada subdominio es elegido entre solo dos metamateriales, esta solución puede ser obtenida adaptando técnicas de optimización topológica ([Bendsøe y Sigmund, 2003](#)). En el caso de un gran conjunto de materiales candidatos, analogías pueden encontrarse con optimización topológica multifase ([Sigmund y Torquato, 1997](#)). Particularmente en este caso, se puede definir la fracción de cada material candidato como una función de variables de diseño continuas, siguiendo el enfoque de Optimización Discreta de Material (DMO) propuesto por [Stegmann y Lund \(2005\)](#), el cual permite el uso eficiente de resolvers de optimización basados en gradientes.

El presente problema de diseño de materiales tiene diferencias importantes con respecto a los

clásicos problemas de optimización topológica. En primer lugar, la función objetivo en optimización topológica es, o el volumen de material, o la rigidez (“compliance”) (Bendsøe y Sigmund, 2003), linealmente dependientes con respecto a las variables de diseño o de estado respectivamente. Mientras tanto, la función objetivo que representa la manipulación de flujo térmico (Ecuación 3.14) es altamente no lineal con respecto a ambas variables. En segundo lugar, considerar el volumen de material (tanto como función objetivo o como restricción) es imperativo en optimización topológica, no así para la presente metodología. Incluso, puede ser interesante minimizar o limitar el volumen de material (por ejemplo, el del material más costoso), pero esto se encuentra fuera del alcance de este Capítulo.

A continuación, se aplica primeramente el enfoque por DMO para el diseño de dispositivos de fácil fabricación para manipular el flujo térmico. Se analizan nuevamente aplicaciones de concentración y camuflaje térmico (Sección 3.3.2), y se diseña una alternativa al dispositivo diseñado en la Sección 3.2.1. Luego, se recurre al concepto de Material Isotrópico Sólido con Penalización (SIMP), clásico en optimización topológica (Bendsøe y Sigmund, 2003), y se diseña un inversor de flujo de calor con camuflaje térmico (Sección 3.3.4).

3.3.1. Optimización Discreta de Material (DMO)

En la Sección 3.1.1 se había definido que en un elemento finito $\Omega^{(e)}$, las propiedades materiales o efectivas eran función de un número finito de parámetros agrupados en un vector $\mathbf{p}^{(e)} = [p_1^{(e)}, p_2^{(e)}, \dots, p_M^{(e)}]$, y de esta manera la conductividad efectiva en el elemento $\Omega^{(e)}$ era

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

Aplicando DMO, se redefine la conductividad efectiva en el elemento $\Omega^{(e)}$ haciendo uso de la siguiente regla de mezclas:

$$\mathbf{k}^{(e)} = \sum_{m=1}^M f_m^{(e)} \mathbf{k}_m, \quad (3.20)$$

donde $f_m^{(e)}$ es la fracción de material m en $\Omega^{(e)}$ con conductividad efectiva \mathbf{k}_m , y se cumple que $0 \leq f_m^{(e)} \leq 1$ y $\sum_i f_i^{(e)} = 1$. Para una mejor fabricabilidad, el material en $\Omega^{(e)}$ debe ser uno de los materiales candidatos en vez de su mezcla, es decir, $f_m^{(e)}$ debería ser uno o cero. Asumiendo $p_m^{(e)} \equiv f_m^{(e)}$ como variables de diseño, estas son del tipo enteras, por lo que la solución del problema de optimización (3.13) requiere de programación entera.

El inconveniente que surge es que programación entera es inviable cuando se trabaja con un gran número de variables de diseño, como lo es el caso en que se discretizan dominios con mallas

muy finas. En esta situación es conveniente utilizar un resolvidor de optimización basado en gradientes, el cual requiere que las variables de diseño sean continuas. Para tal fin es que se recurre al uso de DMO, donde $f_m^{(e)}$ se asume como una función de M variables continuas $\rho_i^{(e)}$, las cuales juegan el rol de variables de diseño, es decir, $p_i^{(e)} \equiv \rho_i^{(e)}$.

Para el óptimo $\rho_i^{(e)}$, $f_m^{(e)}$ debe tender a uno o cero. Stegmann y Lund (2005) estudiaron varias opciones para la función $f_m^{(e)}$, comparándolas en términos no solo de la proximidad a cero o uno en la solución óptima, sino también teniendo en cuenta los efectos de las mismas en la convergencia de la solución, recomendando así utilizar la siguiente expresión:

$$f_m^{(e)} = f_m(\rho_1^{(e)}, \dots, \rho_M^{(e)}) = \frac{f_m^*(\rho_1^{(e)}, \dots, \rho_M^{(e)})}{\sum_{i=1}^M f_i^*(\rho_1^{(e)}, \dots, \rho_M^{(e)})}, \quad (3.21)$$

$$\text{con } f_i^*(\rho_1^{(e)}, \dots, \rho_M^{(e)}) = (\rho_i^{(e)})^p \prod_{j=1, j \neq i}^M [1 - (\rho_j^{(e)})^p]. \quad (3.22)$$

La Ecuación 3.21 define la fracción del material m en el elemento finito e como función de las variables de diseño continuas $\rho_1^{(e)}, \dots, \rho_M^{(e)}$. La forma en que está definida automáticamente hace que $\sum_i f_i^{(e)} = 1$, por lo que no hay necesidad de imponer restricciones para el problema de optimización continua (3.13), el cual solamente esta sujeto a restricciones de caja: $0 \leq \rho_i^{(e)} \leq 1$. Como en optimización topológica (Bendsøe y Sigmund, 2003), valores intermedios de $f_m^{(e)}$ son penalizados ajustando $p \geq 3$ en la Ecuación (3.22).

Validación del método

Con el propósito de validar la metodología de DMO para el diseño de dispositivos manipuladores de flujo térmico, se reproduce el dispositivo propuesto por Vemuri et al. (2014) para bloqueo térmico.

Dada una placa Ω originalmente de material acero al 40 % de níquel (con conductividad isotrópica $k_{\text{ns}} = 10 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$), se diseña un dispositivo que ocupa la región Ω_{libre} para bloquear el flujo de calor en la región central Ω_{fijint} (ver Figura 3.22). Como metamaterial se utilizará un laminado formado por láminas alternadas de cobre y PDMS de igual espesor, con conductividad isotrópica $k_{\text{cobre}} = 398 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $k_{\text{PDMS}} = 0.27 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$. Asumiendo tal laminado como un medio térmico efectivo (Vemuri y Bandaru, 2013), las conductividades principales son

$$k_{\lambda\lambda} = \frac{k_{\text{cobre}} + k_{\text{PDMS}}}{2} = 199.13 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}, \quad k_{\tau\tau} = \frac{2k_{\text{cobre}}k_{\text{PDMS}}}{k_{\text{cobre}} + k_{\text{PDMS}}} = 0.54 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1},$$

donde λ y τ son los ejes principales paralelo y normal a las láminas respectivamente. La ecuación

anterior es solo válida si las láminas tienen un espesor pequeño y alto contraste entre conductividades (Vemuri y Bandaru, 2013). En este caso, tal contraste es marcado ($k_{\text{cobre}}/k_{\text{PDMS}} = 1474$), y en lo que respecta al espesor, siendo el dispositivo del orden de los centímetros, debería ser del orden de 1 mm.

Finalmente, como materiales candidatos para construir el dispositivo manipulador de flujo térmico se adopta este laminado de cobre-PDMS con diferentes orientaciones θ (ángulo entre los ejes λ y x). Además, se intentará hacerlo de la mejor manera posible utilizando solo dos materiales candidatos: el material 1 es un laminado con una orientación $\theta = 45^\circ$, y el material 2 es el mismo laminado pero con $\theta = 135^\circ$.

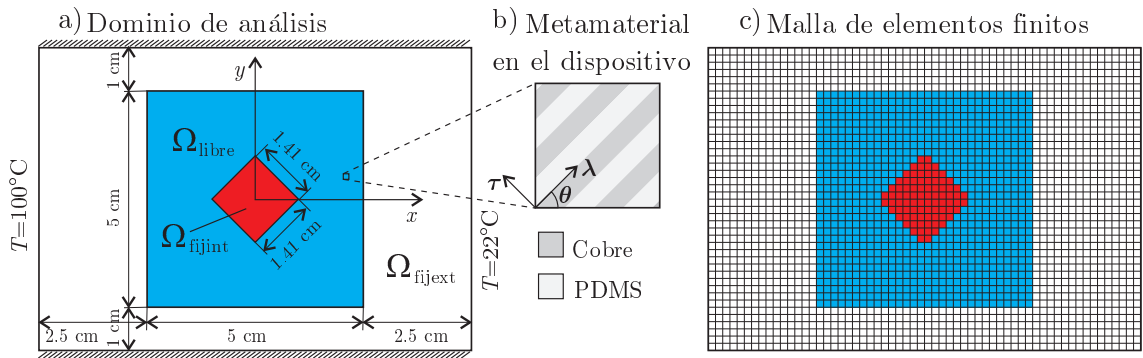


Figura 3.22: Ejemplo de validación: a) dominio de análisis, b) metamaterial utilizado para construir el dispositivo, c) malla de elementos finitos del dominio Ω ; los elementos celestes pertenecen al dispositivo, y en los rojos se prescribe flujo de calor nulo.

Para el análisis por elementos finitos, el dominio Ω se discretiza utilizando $60 \times 42 = 2520$ elementos finitos cuadrados bilineales, como se muestra en la Figura 3.22c, incluidos los 840 dentro del dispositivo Ω_{libre} (los de color celeste).

La tarea de bloqueo térmico se prescribe imponiendo $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{0}$ en los 60 elementos en Ω_{fjint} (los de color rojo en la Figura 3.22c). De esta manera, el problema de minimización (3.13) toma la forma de:

$$\min_{\mathbf{P}} \left[\frac{1}{60} \sum_{q|\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{fjint}}} \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) \right\|^2 \right]^{1/2}. \quad (3.23)$$

Este es un problema de optimización no lineal con 1680 variables de diseño continuas, agrupadas en el vector $\mathbf{P} = [\rho_1^{(1)}, \rho_2^{(1)}, \dots, \rho_2^{(840)}]$ y sujetas a las restricciones de caja $0 \leq P_i \leq 1$. Como punto inicial se toma $\rho_1^{(e)} = \rho_2^{(e)} = 0.5$ en todos los elementos de Ω_{libre} .

Resultados de la validación

El problema de optimización no lineal (3.23) se resuelve utilizando IPOPT (Wächter y Biegler, 2006), junto con un filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001) para no obtener checkerboard.

Las Figuras 3.23a y b muestran las variables de diseño óptimas $\rho_1^{(e)}$ y $\rho_2^{(e)}$ dentro del dispositivo. Luego, utilizando las Ecuaciones (3.21) y (3.22), se calcula la fracción $f_1^{(e)}$ correspondiente al laminado de cobre-PDMS a 45° (material 1), como se muestra en la Figura 3.23c; la fracción a 135° es simplemente $f_2^{(e)} = 1 - f_1^{(e)}$ (material 2). El dispositivo con esa distribución de material cumple con alta eficiencia la tarea de bloqueo térmico: $\text{RMSE} = 1.536 \times 10^{-4} \|\mathbf{q}_0\|$, siendo $\|\mathbf{q}_0\| = 7.8 \text{ kWm}^{-2}$ la magnitud del flujo de calor en la placa sin el dispositivo.

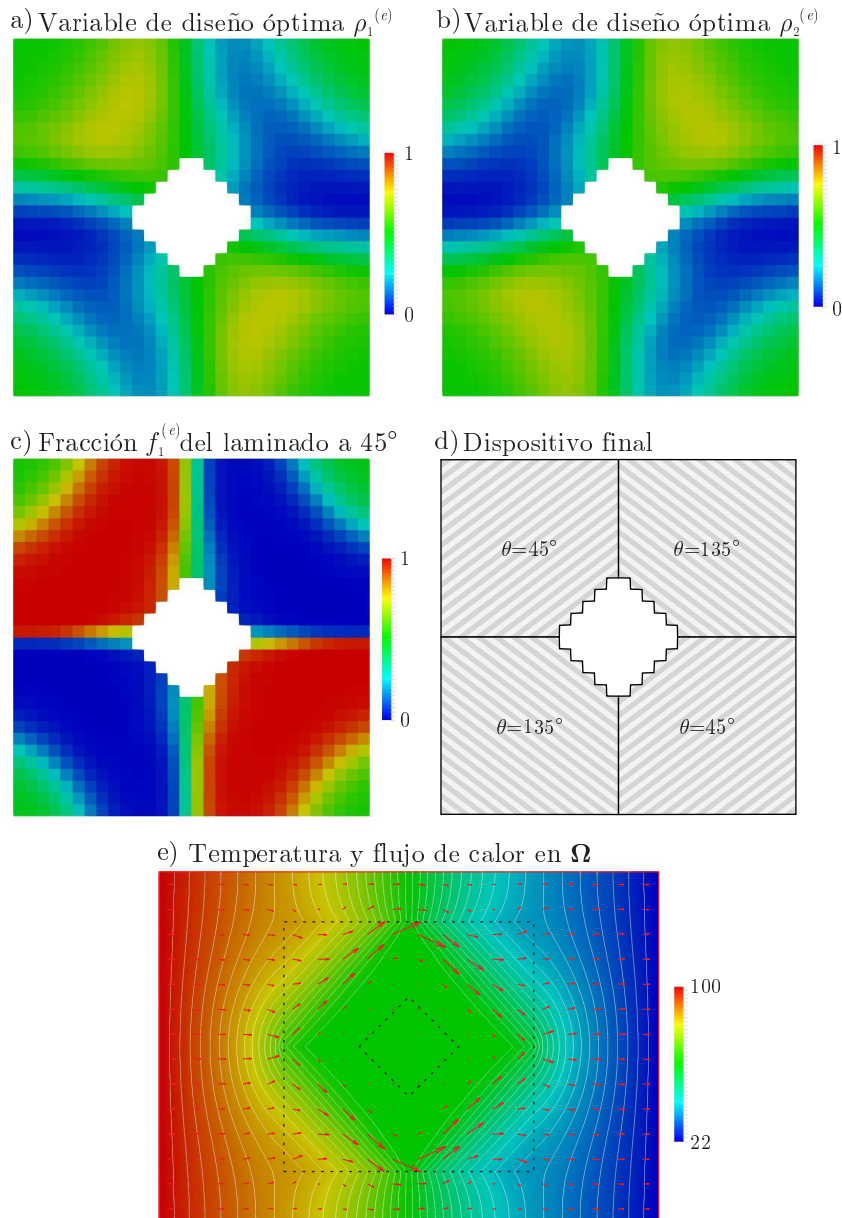


Figura 3.23: Ejemplo de validación: a) variable de diseño $\rho_1^{(e)}$ óptima, b) variable de diseño $\rho_2^{(e)}$ óptima, c) fracción del laminado a 45° para los valores óptimos de $\rho_1^{(e)}$ y $\rho_2^{(e)}$, d) dispositivo final, e) temperatura (mapa de colores con isoterma cada 2°C) y flujo de calor (flechas) en toda la placa.

La distribución de material en la Figura 3.23c está mayoritariamente libre de “zonas grises” (aquellas donde el material no es ninguno de los candidatos pero si una mezcla de los mismos). Pa-

ra evitar completamente estas zonas, se puede recurrir a los filtros de “blanco y negro” (Sigmund, 2007), en donde el material $\Omega^{(e)}$ es aquel con la mayor fracción. Hay que aclarar que este tipo de filtrado se aplica luego de obtener las soluciones óptimas de $f_1^{(e)}$ y $f_2^{(e)}$, es decir, a posteriori. La distribución resultante del metamaterial (discreta y por partes) puede verse en la Figura 3.23d. La misma da origen a las distribuciones de temperatura y flujo térmico que se representan en la Figura 3.23e. La tarea de bloqueo se sigue cumpliendo muy bien: $\text{RMSE} = 9.454 \times 10^{-3} \|\mathbf{q}_0\|$.

Por último, la Figura 3.23d es realmente el dispositivo bloqueador diseñado por DMO, en donde cada cuadrante está hecho con un laminado determinado de cobre-PDMS formando un recubrimiento que protege al dominio Ω_{fijint} . Este diseño coincide con el de Vemuri et al. (2014), y sorprendentemente es la mejor forma de forzar el flujo de calor por fuera de Ω_{fijint} utilizando los dos materiales dados.

3.3.2. Concentrador de flujo de calor por DMO con camuflaje térmico

Se aplica así la metodología de DMO para el diseño de un dispositivo concentrador de flujo térmico con camuflaje como una alternativa al diseñado en la Sección 3.2.1. La Figura 3.24a muestra el dominio de análisis Ω , igualmente de aleación de acero al 40 % de níquel ($k_{\text{ns}} = 10 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$). Nuevamente el dispositivo está sometido a un flujo térmico homogéneo \mathbf{q}_0 con magnitud $\|\mathbf{q}_0\| = 7.14 \text{ kWm}^{-2}$ y dirección $+x$.

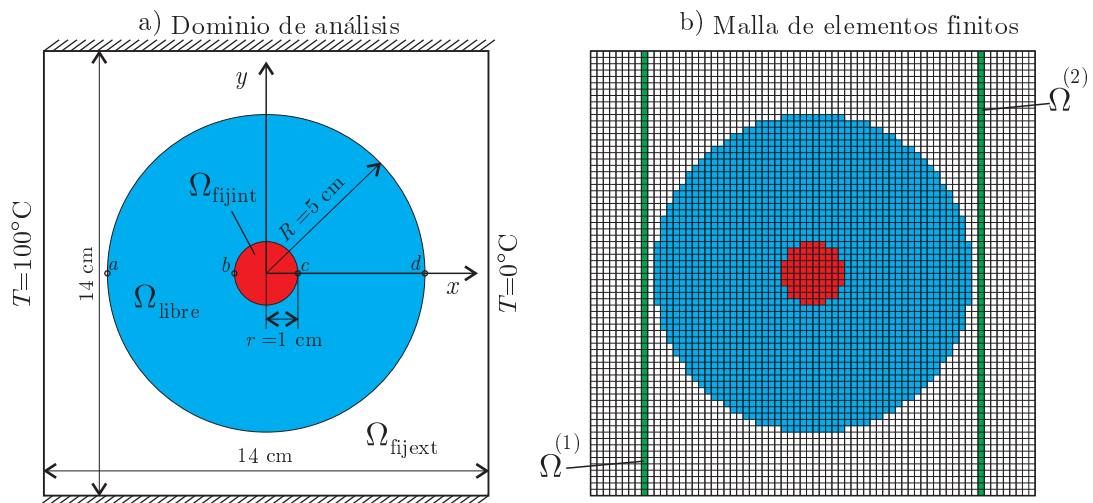


Figura 3.24: Ejemplo de concentración y camuflaje del flujo de calor: a) dominio de análisis, b) malla de elementos finitos del dominio Ω ; los elementos celestes pertenecen al dispositivo, y en los rojos y verdes se prescribe flujo de calor para concentración y camuflaje respectivamente.

Definido así el dominio, se quiere diseñar un dispositivo en la región Ω_{libre} para cumplir simultáneamente las siguientes tareas: 1) concentrar el flujo de calor en Ω_{fijint} , y 2) mantener el mismo inalterado en Ω_{fijext} . Para este caso, tres materiales candidatos van a utilizarse, todos ellos consisten en el mismo laminado de cobre-PDMS, pero con orientaciones diferentes: material 1

con $\theta = 45^\circ$, material 2 con $\theta = 135^\circ$, y material 3 con $\theta = 0^\circ$.

El dominio Ω se discretiza utilizando $70 \times 70 = 4900$ elementos finitos cuadrados bilineales, como se ve en la Figura 3.24b, incluyendo los 1896 elementos dentro del dispositivo Ω_{libre} (de color celeste).

Problema de optimización

Al igual que el dispositivo de la Sección 3.2.1, la tarea de camuflaje $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ se impone en los 140 elementos de las franjas $\Omega^{(1)} \subset \Omega_{\text{fijext}}$ y $\Omega^{(2)} \subset \Omega_{\text{fijext}}$ (los elementos verdes en la Figura 3.24c), mientras que la tarea de concentración es forzada fijando $\bar{\mathbf{q}}^{(q)} = \mathbf{q}_{\text{conc}}$ para los 80 elementos en Ω_{fijint} (los rojos en la Figura 3.24c); en este caso, se adopta $\mathbf{q}_{\text{conc}} = (R/r)\mathbf{q}_0$, siendo $R/r = 5$ la relación entre los radios exterior e interior del dispositivo respectivamente. Luego, el problema de minimización (3.13) toma la forma de:

$$\min_{\mathbf{P}} \left[\frac{1}{220} \left(\sum_{q|\Omega^{(q)} \in \Omega^{(1)} \cup \Omega^{(2)}} \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) - \mathbf{q}_0 \right\|^2 + \sum_{q|\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{fijint}}} \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}) - \mathbf{q}_{\text{conc}} \right\|^2 \right) \right]^{1/2}. \quad (3.24)$$

Este es un problema de optimización no lineal con 5688 variables de diseño continuas agrupadas en el vector $\mathbf{P} = [\rho_1^{(1)}, \rho_2^{(1)}, \rho_3^{(1)}, \dots, \rho_3^{(1896)}]$, y sujetas a las restricciones de caja $0 \leq P_i \leq 1$. Como punto inicial se toma $\rho_1^{(e)} = \rho_2^{(e)} = \rho_3^{(e)} = 1/3$ en todos los elementos de Ω_{libre} . Utilizando IPOPT (Wächter y Biegler, 2006) como resolvidor, y junto con un filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001) para no obtener soluciones con checkerboard, se determina la primer distribución óptima de variables de diseño $\rho_1^{(e)}$, $\rho_2^{(e)}$ y $\rho_3^{(e)}$, las cuales luego son usadas para calcular las fracciones de material $f_1^{(e)}$, $f_2^{(e)}$ y $f_3^{(e)}$ de acuerdo con las Ecuaciones (3.21) y (3.22).

Resultados

Asumiendo de esta manera que el material en un elemento es aquel que posee la mayor fracción (filtrado de “blanco y negro”), se obtiene el dispositivo representado en la Figura 3.25a, el cual produce el campo de temperaturas y flujo de calor que se observan en la Figura 3.25b. Orientando adecuadamente el laminado, el flujo térmico es guiado tan directo como sea posible hacia Ω_{fijint} . Cuantitativamente, el RMSE para la tarea de concentración es $0.284\|\mathbf{q}_{\text{conc}}\| = 0.284(R/r)\|\mathbf{q}_0\|$, y para la tarea de camuflaje tiene un valor de $0.277\|\mathbf{q}_0\|$. En comparación con el dispositivo de la Sección 3.2.1, aumenta más de tres veces para la tarea de concentración y más de cinco para la tarea de camuflaje. De esta manera, se obtiene un dispositivo de más fácil fabricación a expensas de sacrificar rendimiento. El mismo puede fabricarse con técnicas de corte por chorro de agua, por ejemplo. En la Figura 3.26 puede observarse cómo las diferentes orientaciones de

los laminados se logran cortando una placa de material conductor térmico, y luego polimerizando en los canales resultantes un polímero aislante. Este dispositivo fue realizado en los talleres del Centro de Desarrollo de Ciencias Marinas, y en los laboratorios del Departamento de Ingeniería Mecánica y Aeroespacial de la Universidad de California San Diego, Estados Unidos, bajo la ayuda del Profesor P. R. Bandaru.

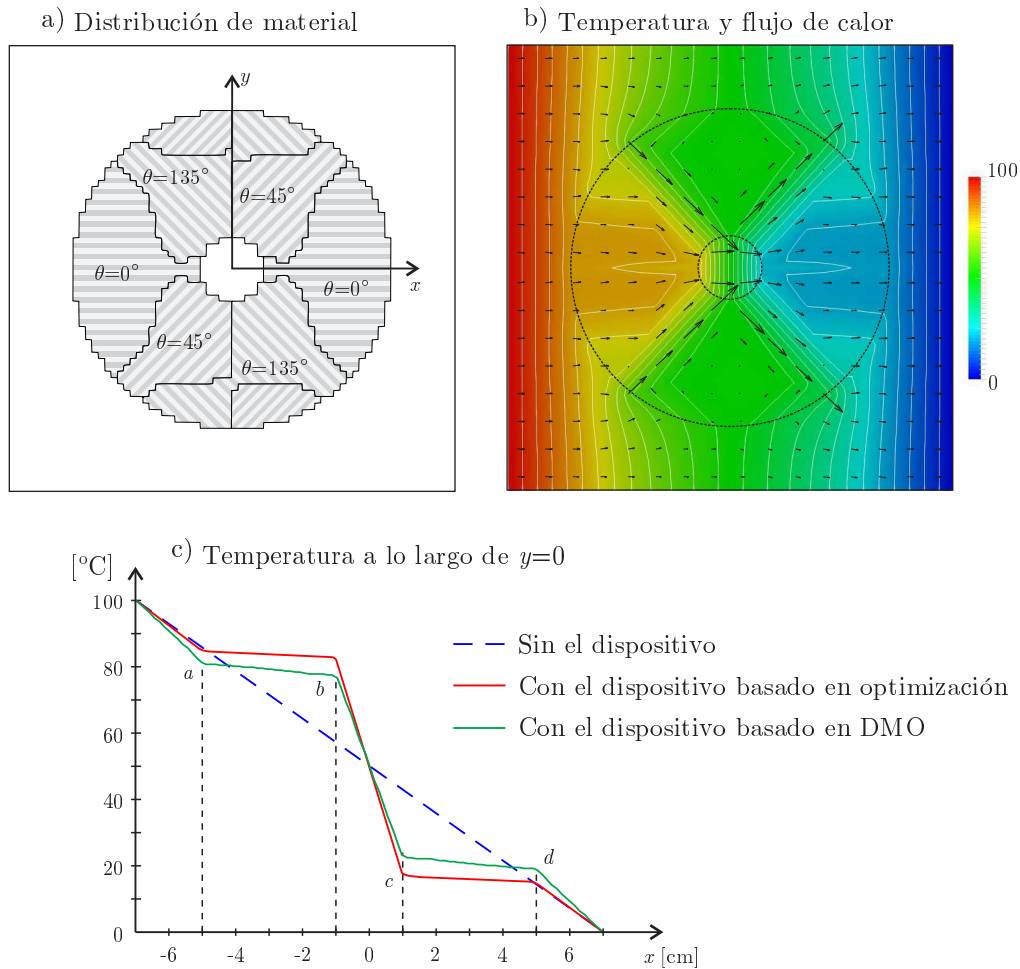


Figura 3.25: Ejemplo de concentración y camuflaje térmico: a) dispositivo diseñado por DMO, b) temperatura (mapa de colores con isotermas cada 4°C) y flujo de calor (flechas) en toda la placa, c) temperatura a lo largo de $y = 0$ para el presente dispositivo basado en DMO y para el diseñado en la Sección 3.2.1.

El dispositivo diseñado por DMO, más allá de las simplificaciones, sigue funcionando satisfactoriamente bien al menos para la tarea de concentración, como se aprecia en la Figura 3.25c, que muestra la distribución de temperatura a lo largo de la línea $y = 0$, y hace una comparación con desempeño del dispositivo de la Sección 3.2.1 que posee una variación continua de la distribución de metamaterial. Para comprobar numéricamente que sigue cumpliendo la tarea de concentración, como se hizo en la Sección 3.2.1, se calcula el índice de eficiencia (Chen y Lei, 2015) $f = (T_c - T_b)/(T_d - T_a)$, donde b y c son los puntos localizados en la frontera de la zona de concentración Ω_{fijint} , y a y d son aquellos ubicados en el borde exterior al dispositivo Ω_{libre} (ver Figura 3.24a). Para el presente dispositivo, se obtiene un $f = 88.37\%$, valor levemente mejor que

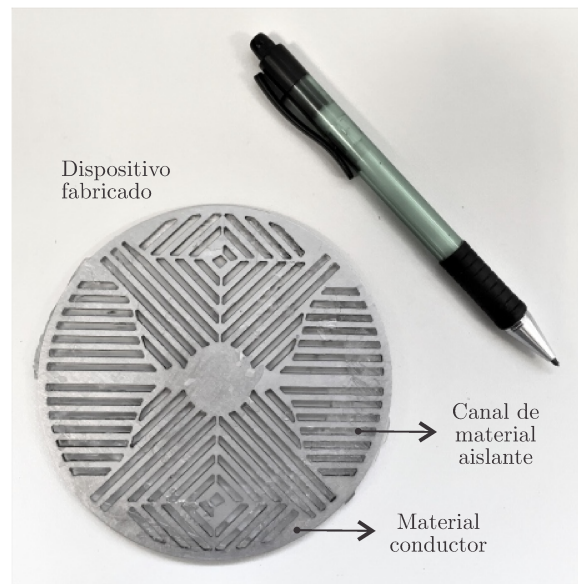


Figura 3.26: Dispositivo fabricado mediante corte por chorro de agua del material conductor, y polimerización del material aislante en los canales resultantes del corte.

el índice del dispositivo fabricado por [Chen y Lei \(2015\)](#). Por último, en lo que respecta a la tarea de camuflaje, puede apreciarse en la Figura 3.25b que se produce una considerable distorsión del campo de temperaturas, en particular en las zonas superior e inferior cercanas al dispositivo, en concordancia con el aumento del RMSE de camuflaje.

Para finalizar, es importante destacar que la importancia que se le da a una tarea u otra puede configurarse variando nuevamente los pesos $w^{(a)}$ (como se hace en la Sección 3.2.3), que en este caso se asumieron constantes. En realidad, el camuflaje no es usualmente la principal tarea, pero la mayoría de los dispositivos en la literatura ([Narayana y Sato, 2012](#); [Chen y Lei, 2015](#)) lo realizan como en efecto colateral de la metodología de transformación de coordenadas.

3.3.3. Material Isotrópico Sólido con Penalización (SIMP)

En los ejemplos diseñados en la Sección 3.2 se utilizan materiales compuestos con conductividad anisótropa prescrita (metamateriales) para manipular el flujo de calor, y luego en la Sección 3.3.1 mediante DMO, se considera la fabricabilidad que permite la materialización de los mismos. En la presente Sección se pretende fabricar el dispositivo más sencillo que permita lograr de la mejor manera la tarea de manipulación de flujo prescrita. Para lograrlo, sin introducir ninguna restricción en el problema de optimización (3.13), se plantea la siguiente simplificación: el material en un elemento finito $\Omega^{(e)}$ puede ser uno de dos materiales candidatos, con conductividad isotrópica k_{\min} y k_{\max} , con $k_{\max} \gg k_{\min}$. Luego, siguiendo el enfoque de Material Isotrópico Sólido con Penalización (SIMP), clásico en optimización topológica ([Bendsøe y Sigmund, 2003](#)), la

conductividad en el elemento $\Omega^{(e)}$ puede definirse como:

$$k^{(e)} = k_{\min} + (\rho^{(e)})^p (k_{\max} - k_{\min}), \quad (3.25)$$

donde $p > 1$, y $\rho^{(e)}$ es una densidad artificial, con $0 \leq \rho^{(e)} \leq 1$. Seleccionando $p \geq 3$, $\rho^{(e)}$ está obligado a ser 0 o 1, es decir, el material en $\Omega^{(e)}$ se fuerza a ser el de conductividad k_{\min} o el de conductividad k_{\max} , respectivamente, en vez de una mezcla de ambos. Observar que, una vez que k_{\min} y k_{\max} son dados, el material en $\Omega^{(e)}$ está completamente determinado por un solo parámetro: $P_e = p_1^{(e)} = \rho^{(e)}$.

3.3.4. Inversor de flujo de calor por SIMP con camuflaje térmico

Se aplica el método de SIMP para el diseño de un dispositivo inversor de flujo térmico con camuflaje como una alternativa al diseñado en la Sección 3.2.3. El dominio de análisis corresponde al de la mencionada Sección y está representado en la Figura 3.14. Además, se utilizan las mismas condiciones de borde y se mantiene como material base de la placa el agua de agar ($k_{\text{agar}} = 0.57 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$), por lo que el flujo de calor en la misma (\mathbf{q}_0) tiene magnitud $q_0 = 245.10 \text{ Wm}^{-2}$ y dirección x . Para el presente dispositivo simplificado se utilizarán dos materiales isótropos y homogéneos, cobre y polimetacrilato de metilo (PMMA), cuyas conductividades son $k_{\max} = 403 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $k_{\min} = 0.22 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, respectivamente.

Problema de optimización

El dispositivo se diseña planteando el problema de optimización definido por la Ecuación (3.13), cuya función objetivo está dada por (3.14), en donde $\mathbf{q}^{(q)} = -\mathbf{q}_0$ se prescribe en todos los elementos en $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{inv}}$ (inversión de flujo de calor), y $\mathbf{q}^{(q)} = \mathbf{q}_0$ (camuflaje térmico) en todos los elementos en $\Omega^{(q)} \in \Omega_{\text{cloak}}$. Al igual que en la Sección 3.2.3, $w^{(q)} = 1/Q$ (con $Q = 3625$) se asume constante.

Las variables de diseño se agrupan en el vector \mathbf{P} , y para SIMP son el conjunto de densidades $P_e = p_1^{(e)} = \rho^{(e)}$ que caracterizan el material en los $N = 4000$ elementos de Ω_{disp} , y cuyas propiedades efectivas (conductividad térmica) están dadas por la expresión 3.25. Además, el presente problema de optimización está sujeto a las siguientes restricciones de caja:

$$0 \leq P_e = \rho^{(e)} \leq 1, \quad \text{con } e = 1, \dots, N.$$

A su vez, el problema de optimización no lineal con restricciones se resuelve con IPOPT (Wächter y Biegler, 2006), y para no obtener checkerboard, se utiliza filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli,

2001), con un radio de filtrado $\tilde{r} = 3.5$ mm (cuatro veces el tamaño promedio de un elemento en Ω_{disp}). Como punto inicial del problema de optimización se toma $\rho^{(e)} = 0.5$, y la solución del mismo es el vector de variables de diseño \mathbf{P} que define la distribución de material en el dispositivo. Tal dispositivo es un anillo que produce la inversión de flujo en la región que encierra, mientras que intenta mantener inalterado el flujo exterior. Ambas tareas se cumplen, si no es exactamente, con un mínimo RMSE.

Análisis de sensibilidad

Para la resolución eficiente del problema de optimización no lineal (3.13) es crucial el cálculo analítico de la sensibilidad de la función objetivo f_{obj} con respecto a cambios en las variables de diseño $P_e = \rho^{(e)}$ (en el caso de SIMP). Se define como $\partial f_{\text{obj}}/\partial P_e$, y esta derivada se calcula utilizando el método adjunto para una mayor eficiencia computacional, como sugieren Tortorelli y Michaleris (1994). Para tal fin, la función objetivo f_{obj} se reescribe como

$$f_{\text{obj}}(\mathbf{P}) - \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{KT} - \mathbf{F}), \quad (3.26)$$

donde el último término es nulo en virtud de la ecuación de equilibrio (3.6), y $\boldsymbol{\lambda}$ es un vector real arbitrario (a determinar).

Diferenciando la ecuación (3.26) con respecto a P_e , se obtiene

$$\begin{aligned} \frac{df_{\text{obj}}}{dP_e} &= \left. \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial P_e} \right|_{\mathbf{T}=\text{constante}} + \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial \mathbf{T}} \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial P_e} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_e} \mathbf{T} + \mathbf{K} \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial P_e} \right) \\ &= \left. \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial P_e} \right|_{\mathbf{T}=\text{constante}} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_e} \mathbf{T} - \left(\mathbf{K} \boldsymbol{\lambda} - \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial \mathbf{T}} \right) \cdot \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial P_e}, \end{aligned} \quad (3.27)$$

donde

$$\frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial \mathbf{T}} = -\frac{1}{f_{\text{obj}}} \sum_{q=1}^Q k^{(q)} w^{(q)} \left(\mathbf{q}^{(q)} - \bar{\mathbf{q}}^{(q)} \right) \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(q)}), \quad (3.28)$$

$$\left. \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial P_e} \right|_{\mathbf{T}=\text{constante}} = -\frac{1}{f_{\text{obj}}} \sum_{q=1}^Q \frac{\partial k^{(q)}}{\partial P_e} w^{(q)} \left(\mathbf{q}^{(q)} - \bar{\mathbf{q}}^{(q)} \right) \mathbf{B}(\mathbf{x}^{(q)}) \mathbf{T}, \quad (3.29)$$

$$\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_e} = \frac{\partial k^{(e)}}{\partial P_e} \int_{\Omega^{(e)}} \mathbf{B}^T \mathbf{B} dV. \quad (3.30)$$

Siendo $k^{(q)}$ la conductividad en el punto $\mathbf{x}^{(q)} \in \Omega^{(q)}$ dado por la ecuación (3.25), y su derivada con respecto a las variables de diseño P_e (densidad artificial en el elemento $\Omega^{(e)}$) es

$$\frac{\partial k^{(q)}}{\partial P_e} = \begin{cases} pP_e^{p-1}(k_{\max} - k_{\min}) & \text{si } \mathbf{x}^{(q)} \in \Omega^{(e)}, \\ 0 & \text{en los demas casos.} \end{cases} \quad (3.31)$$

Notar que si todos los puntos de control $\mathbf{x}^{(q)}$ pertenecen a elementos con densidad fija, la derivada dada por la ecuación (3.29) es nula. Normalmente, se coloca un punto de control por elemento finito, por lo tanto, incluso si los puntos de control caen en un elemento con densidad desconocida, la sumatoria en la ecuación (3.29) tiene al menos un solo término.

Ahora, para evitar el costo computacional de calcular $\partial \mathbf{T} / \partial P_e$ en la ecuación (3.27), se adopta λ como solución de la siguiente ecuación lineal:

$$\mathbf{K}\lambda - \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial \mathbf{T}} = \mathbf{0}. \quad (3.32)$$

Finalmente, una vez que se determina λ , la sensibilidad de la función objetivo al cambio de la densidad artificial en el elemento finito $\Omega^{(e)}$ es

$$\frac{df_{\text{obj}}}{dP_e} = \left. \frac{\partial f_{\text{obj}}}{\partial P_e} \right|_{\mathbf{T}=\text{constante}} - \lambda \cdot \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_e} \mathbf{T}. \quad (3.33)$$

Resultados

La Figura 3.27a muestra la solución óptima para la fracción de cobre en el dispositivo, dada en cada elemento $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{disp}}$ por $w_{\text{cobre}}^{(e)} = (\tilde{P}_e)^p$, con $0 \leq w_{\text{cobre}}^{(e)} \leq 1$; $w_{\text{cobre}}^{(e)} = 0$ implica que el material en $\Omega^{(e)}$ es PMMA. La Figura 3.27b muestra la distribución de temperatura junto con las isothermas en la placa como resultado de introducir el dispositivo. La Figura 3.27c describe la temperatura a los largo de la línea AF, donde claramente se aprecia como el gradiente térmico es invertido en el segmento CD.

Cuantitativamente, tal dispositivo logra la tarea combinada de inversión y camuflaje con un $\text{RMSE} = 0.2788q_0$; individualmente, $\text{RMSE} = 0.2287q_0$ para la tarea de inversión en Ω_{inv} , y $\text{RMSE} = 0.3372q_0$ para el camuflaje en Ω_{cloak} .

La estructura en forma de abanico observada en la Figura 3.27a está también presente en el dispositivo de Narayana y Sato (2012), pero, mientras el presente dispositivo tiene solo dos brazos, el de los autores tiene 96. No solo el dispositivo de la Figura 3.27a es más simple, sino que también logra mejor la tarea de inversión. El flujo de calor calculado numéricamente es $\mathbf{q}^{(c)} = -0.56q_0[\cos 24^\circ \ \sin 24^\circ]^T$ en el centro del dispositivo en (Narayana y Sato, 2012), mientras que es $\mathbf{q}^{(c)} = -0.84q_0[\cos(-6^\circ) \ \sin(-6^\circ)]^T$ en el dispositivo diseñado por optimización. Respecto

a la tarea de camuflaje, la bondad del dispositivo propuesto por Narayana y Sato (2012) no fue evaluada cuantitativamente en el trabajo de los mismos. Analizando el presente dispositivo, la misma no se cumple de forma muy satisfactoria en todo Ω_{cloak} , ya que se produce una compresión de las isotermas, aguas arriba y abajo en el eje x del dominio Ω (línea AF). Al igual que en la Sección 3.2.3, los pesos $w^{(q)}$ para la tarea de camuflaje podrían incrementarse para cumplirla con un menor error, pero no es alcance de la presente Sección.

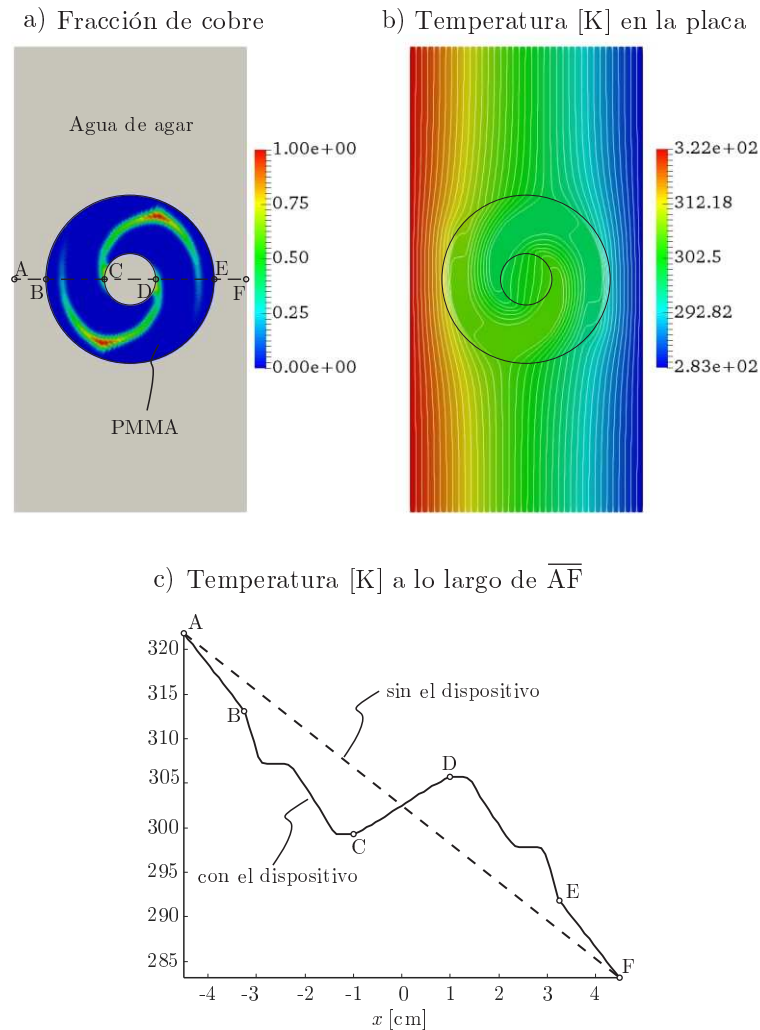


Figura 3.27: Solución óptima para el dispositivo inversor de flujo térmico con camuflaje: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isotermas separadas por 0.9923 K; c) temperatura a lo largo de la línea AF.

3.3.5. Inversor de flujo de calor por SIMP sin camuflaje térmico

Además de la bondad en el cumplimiento de una tarea determinada, los resultados de la Sección 3.3.4 muestran otra crucial ventaja del enfoque por optimización para diseñar dispositivos manipuladores de flujo térmico con respecto a la metodología por transformación de coordenadas: únicamente la tarea que se desea es la realizada. De esta manera, el dispositivo así diseñado no se “sobredimensiona”, es decir, no necesita de 96 brazos para invertir el flujo proveniente de todas

direcciones, sino que con solo dos lo logra para el flujo prescrito, que en este caso es unidireccional.

Ahora, si la tarea deseada es solo invertir el flujo térmico, la tarea de camuflaje es un efecto colateral de aplicar la metodología de transformación de coordenadas. Se demuestra en esta Sección que la tarea de inversión puede lograrse más eficientemente si la tarea de camuflaje es eliminada.

Problema de optimización

El problema de optimización es idéntico al resuelto en la Sección 3.3.4, excepto por los términos de Ω_{cloak} en la función objetivo (3.19) que ahora están excluidos (de esta manera, $Q = N_{\text{inv}} = 2125$). Este problema es resuelto utilizando la misma estrategia que la utilizada previamente para la tarea combinada de inversión y camuflaje: se utiliza IPOPT (Wächter y Biegler, 2006) como resolvidor del problema de optimización, $p = 3$ en la función de SIMP para la conductividad (3.25), $\tilde{r} = 3.5$ mm para la definición del radio de filtrado en (3.18), y $P_e = 0.5$ como punto de inicio del problema de optimización.

Resultados

En la Figura 3.28a se puede apreciar la solución óptima para la fracción de cobre en el dispositivo, el cual produce la distribución de temperatura e isoterma sobre la placa que se muestra en la Figura 3.28b; la Figura 3.28c muestra un detalle de la temperatura a lo largo de la línea central AF. En este ejemplo, la tarea de inversión es muy bien lograda con un $\text{RMSE} = 0.0048q_0$, casi 48 veces más chico que el RMSE de la tarea de inversión en el dispositivo para inversión y camuflaje térmico simultáneo (Sección 3.3.4).

Es aparente por la Figura 3.28a que la solución no está libre de “zonas grises”, es decir, de aquellos elementos donde $0 < P_e < 1$, haciendo que el material no sea ni cobre ni PMMA, sino una mezcla de ambos. Esto dificulta la fabricación del dispositivo, lo que es un inconveniente si se quiere lograr un dispositivo de fácil realización. Para evitar estas zonas grises, se puede recurrir a los filtrados de “blanco y negro” (Sigmund, 2007) usados en la Sección 3.3.1. En este caso, se utiliza un simple filtrado de blanco y negro a posteriori (finalizado el proceso de optimización) con la siguiente estrategia: si la fracción de cobre $w_{\text{cobre}}^{(e)}$ en un elemento $\Omega^{(e)}$ es mayor a un cierto valor w^* , el elemento se asume hecho de 100 % cobre; de otra manera, se asume hecho de PMMA. Luego de realizar este filtrado con diferentes valores de w^* , la tarea no es tan bien resuelta como con la solución óptima con grises de la Figura 3.28a. Observando la Figura 3.29, es aparente que el mejor compromiso entre optimalidad y fabricabilidad se obtiene para un valor $w^* = 0.02$, con un $\text{RMSE} = 0.4499q_0$ para la tarea de inversión. La correspondiente distribución de material,

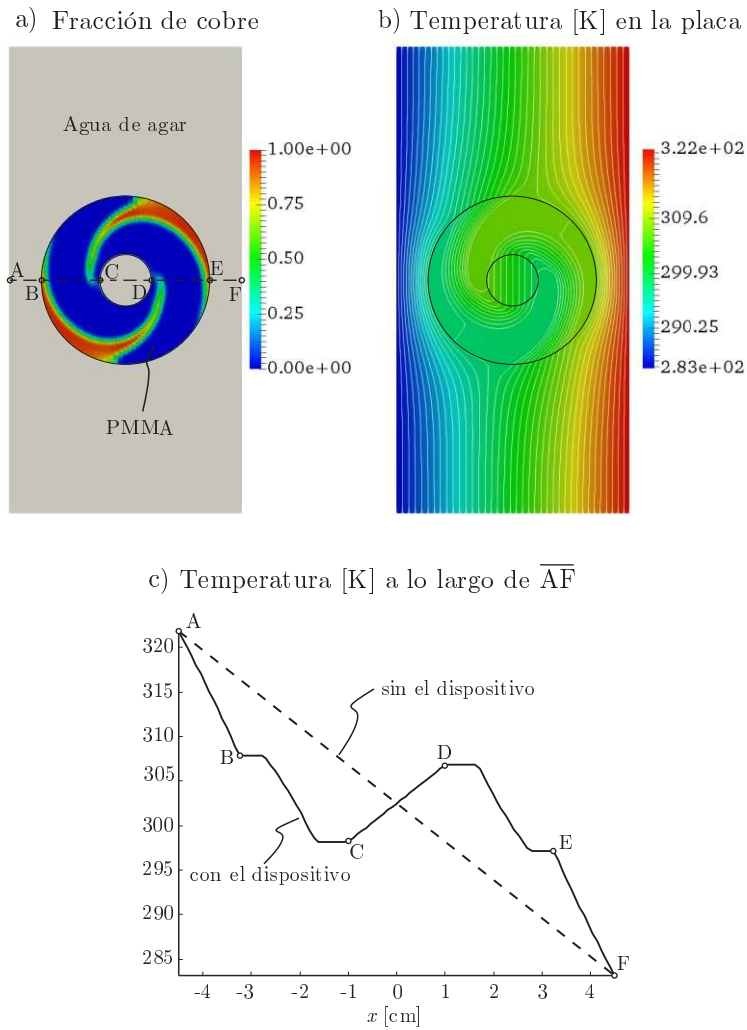


Figura 3.28: Solución óptima para el dispositivo inversor de flujo térmico: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isotermas separadas por 0.9923 K; c) temperatura a lo largo de la línea AF.

temperatura e isotermas se puede apreciar en la Figura 3.30.

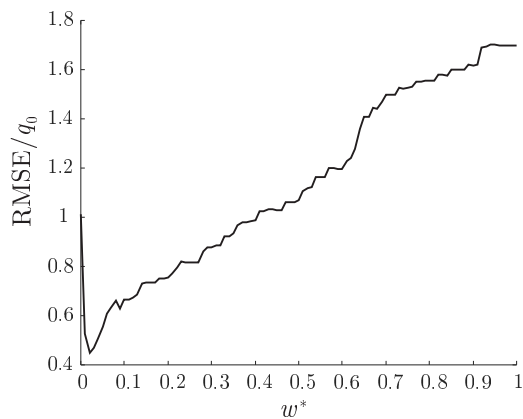


Figura 3.29: RMSE para la tarea de inversión en función del parámetro w^* (el umbral por encima del cual se supone que la fracción de cobre es unitaria).

Notar que el cumplimiento de la tarea de inversión se ha deteriorado considerablemente cuando los grises son eliminados: este es el precio a pagar por la manufacturabilidad. No obstante,

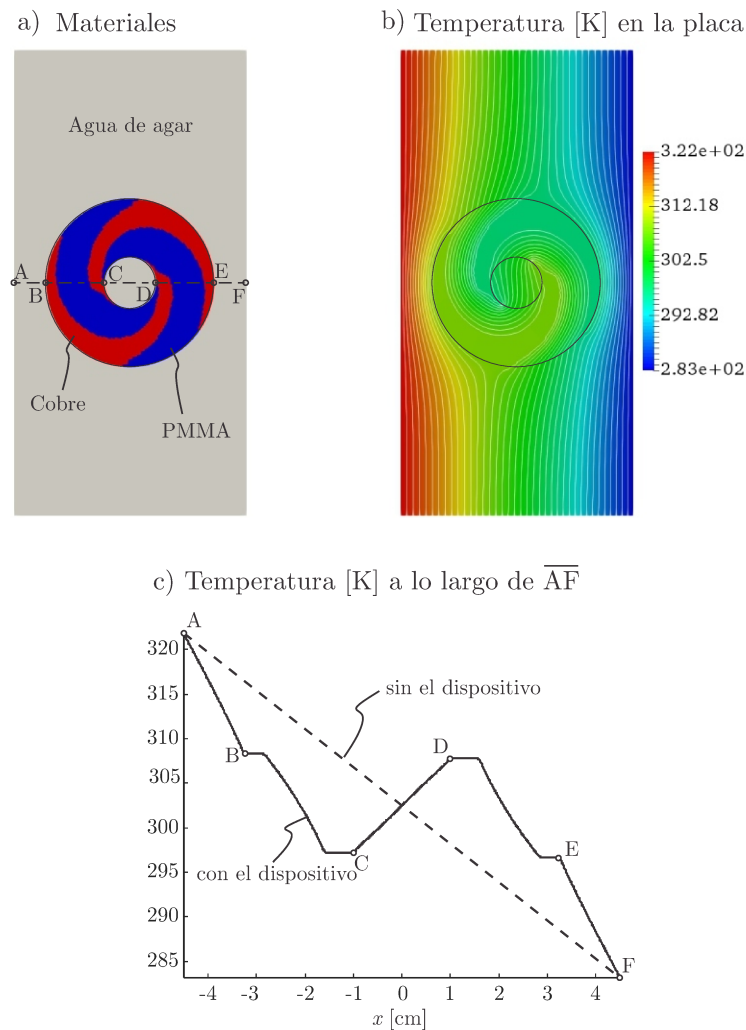


Figura 3.30: Dispositivo inversor de flujo térmico luego del filtrado de blanco y negro de la solución óptima: a) Distribución de material; b) temperatura en la placa, con isothermas separadas por 0.9923 K; c) temperatura a lo largo de la línea AF.

considerando la tarea de inversión, el dispositivo simplificado de la Figura 3.30a posee mejor rendimiento que el de Narayana y Sato (2012), y es de más fácil fabricación.

3.3.6. Otras aplicaciones por SIMP

Como se destaca en secciones anteriores, el presente enfoque permite adaptar diferentes tareas de manipulación de flujo de calor utilizando la misma función objetivo. Así, las funciones objetivos para camuflaje, inversión, concentración y bloqueo (como así también otras tareas donde el flujo de calor tiene que tomar valores prescritos en una serie de puntos) tienen las mismas unidades y pueden ser fácilmente combinadas (por ejemplo, utilizando el método clásico de sumas ponderadas (Marler y Arora, 2010)). Esto es una ventaja crucial respecto al enfoque basado en optimización propuesto por Dede et al. (2014), en donde las funciones objetivos para concentración y bloqueo de los dispositivos que se diseñan tienen unidades de flujo térmico por unidades de longitud, mientras

que para inversión es la suma ponderada de dos términos con diferentes unidades (de flujo térmico y del cuadrado de flujo térmico). En esta sección se muestran otras aplicaciones del enfoque por optimización utilizando SIMP. Ejemplos de concentración de flujo de calor y de bloqueo térmico son desarrollados.

Problema de optimización

En todos los casos analizados en esta Tesis, la función objetivo es la definida por la ecuación (3.14) con $\bar{q}^{(q)} = \alpha q_0$, donde q_0 es el flujo de calor externo dado, y $\alpha = -1$ para los elementos en la zona de inversión, $\alpha = 1$ para aquellos en la zona de camuflaje, $\alpha = 0$ para los de la zona en donde se quiere bloquear el flujo térmico, y $\alpha > 1$ para aquellos en la zona de concentración.

Para los presentes problemas, el dominio y las condiciones de borde se detallan en la Figura 3.14, donde Ω_{inv} (la región encerrada por el dispositivo) ahora se refiere tanto a la zona de concentración como a la de bloqueo. En Ω_{cloak} , es decir, fuera del dispositivo, ninguna tarea se prescribe. Siendo estos problemas idénticamente similares a los resueltos en las Secciones 3.3.4 y 3.3.5, se utiliza la misma estrategia para resolverlos: IPOPT (Wächter y Biegler, 2006) es el resolvidor de optimización, $p = 3$ en la función de conductividad por SIMP (3.25), $\tilde{r} = 3.5$ mm en la definición del filtro de densidad (3.18), y $P_e = 0.5$ como valor inicial del problema de optimización.

Resultados

La solución para el problema de concentración con $\alpha = d_{ext}/d_{int} = 3.125$ es la distribución de material que se muestra en la Figura 3.31a, la cual produce la distribución de temperatura de la Figura 3.31b. Para esta solución, el error en el cumplimiento de la tarea de concentración (función objetivo) es $RMSE = 0.67q_0 = 0.21\alpha q_0$, y el flujo de calor promedio en todos los elementos finitos encerrados por el dispositivo es $[2.63 \ 0.00]^T q_0$.

Para bloqueo térmico, la solución del problema de optimización determina la distribución de material mostrada en la Figura 3.32a, causando la distribución de temperatura de la Figura 3.32b. Para esta solución, la función objetivo tiene un valor $RMSE = 0.0003q_0$, y el flujo de calor promedio en todos los elementos finitos que encierra el dispositivo es $[0.07 \ 0.00]^T q_0$.

3.4. Validación experimental

3.4.1. Inversor de flujo térmico

En esta Sección se quiere resaltar la fácil manufacturabilidad del dispositivo diseñado en la Sección 3.3.5 para invertir el flujo térmico, como así también validar experimentalmente los resul-

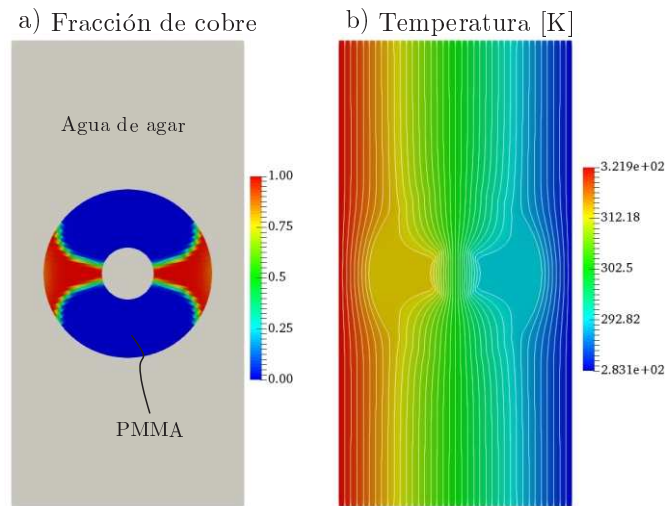


Figura 3.31: Solución óptima para el dispositivo concentrador de flujo térmico: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isotermas separadas por 0.9923 K.

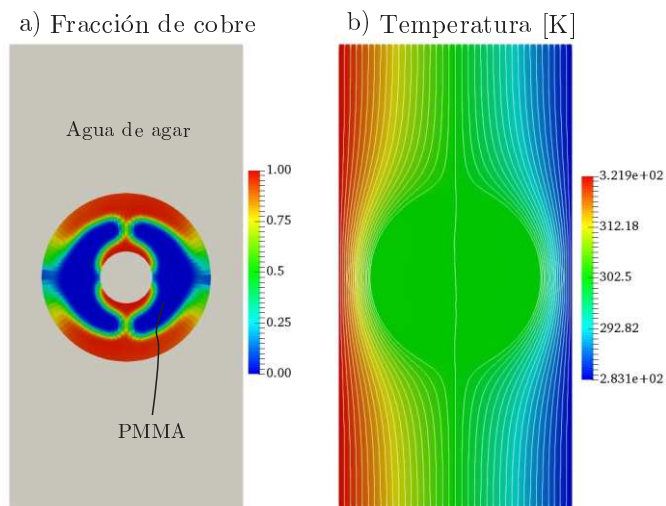


Figura 3.32: Solución óptima para el dispositivo bloqueador de flujo térmico: a) Fracción de cobre en el dispositivo; b) temperatura en la placa, con isotermas separadas por 0.9923 K.

tados numéricos obtenidos.

La Figura 3.33a muestra el dispositivo experimental fabricado siguiendo el diseño de la Figura 3.30a. Es de tan fácil fabricación que el mismo puede realizarse artesanalmente, como se hizo en este caso. Utilizando una sierra de joyero, las dos hélices de cobre se cortan de una placa de 4 mm de espesor, y las dos de PMMA también de una placa del mismo espesor. Los cortes se realizan con una tolerancia de ± 0.5 mm. Todas las partes así cortadas se ensamblan utilizando un adhesivo de cianoacrilato, el cual llena completamente los huecos entre el cobre y PMMA (defectos de fabricación). Este adhesivo posee una conductividad de $0.2 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, cercana a la de PMMA; de esta manera, considerando el estado estacionario para conducción del calor, puede considerarse que la interfaz cobre/PMMA se comporta casi como PMMA.

Se coloca el dispositivo en el centro de una bandeja horizontal, cuya base y paredes laterales



Figura 3.33: Experimento de inversión de flujo térmico: a) dispositivo artesanal; b) dominio de análisis; c) configuración del experimento.

están hechas de láminas de polietileno expandido (PE) de 5 cm de espesor, material de muy baja conductividad térmica (cerca a $0.04 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$). Esta bandeja está equipada con tubos de cobre de 5 mm de diámetro ubicados en los laterales para materializar las condiciones de borde del problema. A continuación, una solución acuosa de 3 % de agar es vertida en la bandeja, que luego se deja enfriar hasta los 277.15 K durante 12 horas para que se transforme en un gel. Como resultado, se logra un excelente contacto en las interfaces agar/dispositivo y agar/tubos-de-cobre. La Figura 3.33b muestra la configuración experimental del dominio de testeo, incluyendo el dispositivo embebido en el gel de agar. Para recrear las condiciones de borde del problema, uno de los tubos de cobre es conectado a un circuito cerrado de agua a $T_c = 303.15 \text{ K} \pm 0.01 \text{ K}$, y el otro a uno con agua a $T_f = 283.15 \text{ K} \pm 0.01 \text{ K}$. La temperatura y los flujos de agua caliente y fría son controlados utilizando un circulator termostático Julabo TD-12. El experimento se lleva a cabo en un ambiente controlado, con una temperatura de $293.65 \text{ K} \pm 0.5 \text{ K}$, mientras que la temperatura del dominio al comienzo del experimento (es decir, cuando se enciende el circulator) es de 293.15 K. La evolución de la temperatura a lo largo del experimento se registra utilizando una cámara infrarroja Fluke Ti100, la cual posee una precisión de $\pm 2 \text{ K}$ para el rango de temperatura del experimento. En la Figura 3.33c se observa toda la configuración del experimento.

Hay que resaltar que el presente dispositivo reproduce las hipótesis del modelo numérico (aquellas del experimento de Narayana y Sato (2012)) en lo que concierne a la geometría del dispositivo y de la placa de agar, a los materiales utilizados, y a las condiciones de borde, excepto por la temperatura prescrita T_c en el lado caliente ($x = -L_x/2$).

La temperatura original $T_c = 321.85$ K tanto en el experimento de Narayana y Sato (2012) como en el presente modelo numérico no puede utilizarse, ya que produce la fusión del agua de agar en las cercanías del tubo de cobre caliente. Debido a que esto invalidaría la hipótesis de conducción pura, se decide por adoptar en el experimento una temperatura menor $T_c = 303.15$ K. De esta manera, la magnitud del flujo de calor en la placa sin el dispositivo es $q_0 = 126.67$ Wm⁻², y la nueva distribución de temperatura es cualitativamente idéntica a la mostrada en la Figura 3.30b, donde solo debe cambiarse el límite superior del rango de temperatura. De esta forma, la habilidad del presente dispositivo para invertir el flujo térmico no se ve afectada por este cambio.

Resultados

La línea de tiempo del experimento se asume que comienza cuando el circulador es encendido para llevar los tubos de cobre a sus respectivas temperaturas. En ese instante, el dominio de prueba (mostrado en la Figura 3.33b) se encuentra a 293.15 K. Luego, la evolución de la temperatura del mismo se registra cada cinco minutos. A lo largo de todo el experimento, la temperatura ambiente se mantiene en 293.65 K \pm 0.5 K.

Luego de 45 minutos, Figura 3.34a, la placa de agar cercana al tubo frío adquiere la temperatura prescrita T_f , pero el lado caliente todavía se encuentra 8K debajo de T_c . No obstante, notar que la inversión de flujo de calor en el centro de la placa ya se encuentra en desarrollo. Luego de 80 min, Figura 3.34b, la temperatura en el lado caliente alcanza T_c . A los 110 min, Figura 3.34c, el campo de temperatura en toda la placa de agar con el dispositivo embebido puede considerarse que alcanza el estado estacionario, y el flujo de calor es claramente invertido en el centro.

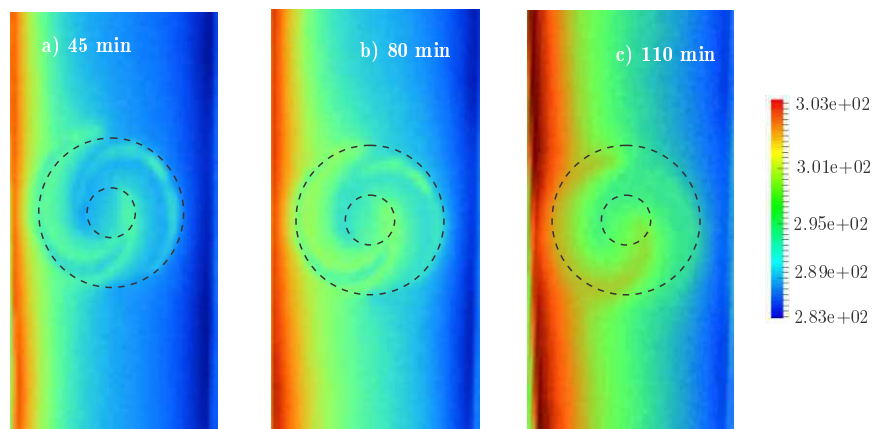


Figura 3.34: Imágenes térmicas de la placa de agar y del dispositivo obtenidas con la cámara infrarroja: a) 45 minutos; b) 80 minutos; y c) 110 minutos.

Estas observaciones pueden ser cuantitativamente analizadas utilizando las curvas en la Figura 3.35, las cuales muestran la evolución de la temperatura a lo largo de la línea central AF durante el experimento, junto también con la temperatura estacionaria calculada numéricamente. En base

a la temperatura experimental registrada a los 110 min, un promedio del flujo de calor a través de la región central puede definirse como

$$q_{\text{inv}} = -k_{\text{agar}} \frac{T_C - T_D}{d_{\text{int}}} = 97.98 \text{ Wm}^{-2}. \quad (3.34)$$

Este flujo apunta en sentido opuesto a q_0 , y su magnitud es $0.77q_0$. Al hacerlo, el presente dispositivo se comporta mejor que el inversor fabricado por Narayana y Sato (2012), donde la magnitud del flujo inverso es solo 0.40 veces la magnitud del flujo original. A su vez, hay que resaltar que el presente dispositivo es considerablemente más fácil de fabricar que aquel de Narayana y Sato (2012).

Además, como se observa en la Figura 3.35, cualitativamente existe una buena concordancia entre la temperatura numérica estacionaria y la experimental para 110 min. Las diferencias entre ambas curvas son siempre menores que 2 K en magnitud, valor que coincide con la precisión de la cámara infrarroja utilizada en el experimento.

Respecto del gradiente de temperatura invertido en el centro del segmento CD, que el experimental sea menor que el numérico puede deberse a las pérdidas de calor a través de la superficie superior del dispositivo experimental, las cuales no son consideradas en el modelo numérico. La ausencia de transferencia de calor a través de la placa en el modelo numérico puede también explicar por qué las mesetas observadas en la curva numérica justo después de los puntos B y D y justo antes de aquellos C y E se suavizan en la curva experimental.

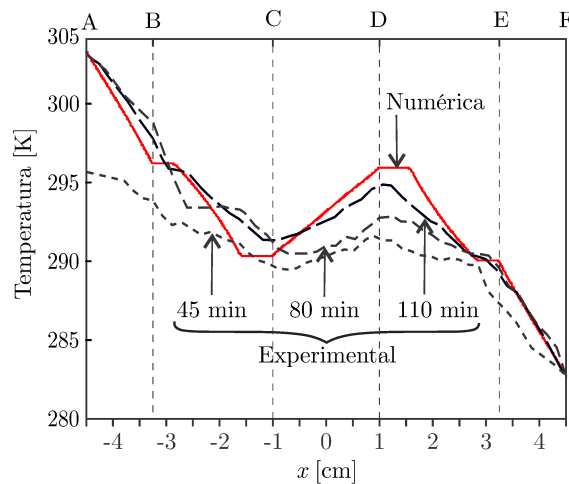


Figura 3.35: Temperatura a lo largo de la línea AF: experimental vs. numérica.

Capítulo 4

Diseño computacional de metamateriales mecánicos en régimen estático

4.1. Metamateriales mecánicos

Los metamateriales mecánicos son materiales de diseño cuyas estructuras internas permiten obtener propiedades mecánicas novedosas, como por ejemplo, relaciones de Poisson negativas, ultra rigidez con bajas densidades, o compresibilidad negativa. Como se comenta en la Sección 1.1, más allá de Electromagnetismo, el concepto de transformación de coordenadas se utilizó exitosamente para el diseño de metamateriales para conducción de calor (Narayana y Sato, 2012; Schittny et al., 2013), difusión de masa (Guenneau y Puvirajesinghe, 2013; Restrepo-Flórez y Maldovan, 2016), y acústica (Chen et al., 2007; Cummer et al., 2008; Zhang et al., 2011c), por citar algunos, aprovechando el hecho de que las ecuaciones involucradas permanecen invariantes ante un cambio de coordenadas (Milton, 2004; Pendry et al., 2006). Sin embargo, para sólidos elásticos, según Milton et al. (2006), las ecuaciones de la mecánica del continuo derivadas de la ley de Newton y de la de Hook generalizada no cumplen con estas características, y demuestran la necesidad de utilizar, más allá del tensor estándar de cuarto orden, tensores adicionales de tercer orden para lograr ejemplos de camuflaje mecánico. Para evitar esto, Brun et al. (2009), aplican estas transformaciones sin la necesidad de incorporar estos tensores adicionales, pero lo hacen rompiendo la simetría del tensor elástico de cuarto orden, lo que produce materiales anisótropos de Cosserat (Cosserat y Cosserat, 1909), sobre los cuales muy poco se conoce acerca de la forma de materializarlos. Norris y Shuvalov (2011) demuestran además que estas transformaciones producen materiales de Willis (Willis, 1981), los cuales tienen a los materiales de Cosserat como

casos particulares simplificados.

A pesar de estas dificultades, varios investigadores han realizado esfuerzos considerables para fabricar los metamateriales derivados de la transformación de coordenadas. Por ejemplo, [Stenger et al. \(2012\)](#) diseñaron un dispositivo circular para camuflaje mecánico, con propiedades elásticas efectivas que variaban radialmente. Luego, [Kadic et al. \(2012\)](#) propusieron utilizar materiales pentamodales para intentar imitar las propiedades derivadas de estas transformaciones, y seguidamente [Bückmann et al. \(2014\)](#) utilizaron estos materiales para lograr camuflaje mecánico en régimen estático.

Considerando entonces el escaso conocimiento acerca de la realización de materiales específicos de Willis o de Cosserat, [Bückmann et al. \(2015\)](#) proponen un enfoque basado en reticulados para el diseño de metamateriales mecánicos realizables. Esta metodología permite determinar la geometría de fabricación de los reticulados que forman el material, para lograr así las propiedades requeridas. Sin embargo, el enfoque se limita a este tipo específico de materiales. Teniendo en cuenta todas estas desventajas de la metodología de transformación de coordenadas aplicada al campo de la Elasticidad, se propone la utilización del enfoque basado en optimización para el diseño de metamateriales mecánicos fabricables.

4.1.1. Campo de desplazamientos en un cuerpo heterogéneo

Sea Ω originalmente un cuerpo hecho de un material arbitrario, y \mathbf{u}_0 el campo de desplazamientos en Ω bajo determinadas tracciones $\bar{\mathbf{t}}$ y desplazamientos impuestos $\bar{\mathbf{u}}$ en las porciones $\partial\Omega_t$ y $\partial\Omega_u$, respectivamente, de la frontera $\partial\Omega$ de Ω . Luego, se asume que una inclusión de un segundo material, de mayor o menor rigidez que el material original, es insertada en la región $\Omega_{\text{incl}} \subset \Omega$, como se muestra en la Figura 4.1. La presencia de una inclusión afecta sensiblemente el campo de desplazamientos en Ω , el cual ahora es \mathbf{u} .

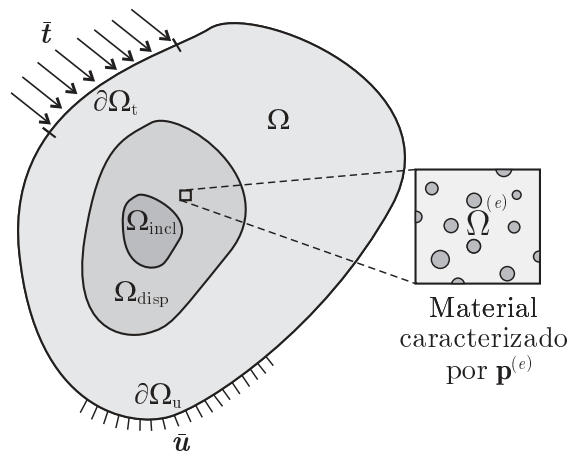


Figura 4.1: Dominio, condiciones de borde de carga y desplazamientos en el cuerpo Ω con una inclusión Ω_{incl} , que debe ser camuflada utilizando el dispositivo Ω_{disp} con una microestructura no homogénea.

Utilizando el método de elementos finitos (MEF), el desplazamiento \mathbf{u} en cualquier punto $\mathbf{x} \in \Omega$ se aproxima como:

$$\mathbf{u}(\mathbf{x}) = \sum_{n=1}^{N_{\text{nod}}} \phi_n(\mathbf{x}) \mathbf{u}_n = \mathbf{\Phi} \mathbf{U}, \quad (4.1)$$

donde ϕ_n es la función de forma asociada al nodo n de la malla de elementos finitos de Ω , $n = 1, 2, \dots, N_{\text{nod}}$, y \mathbf{u}_n es el desplazamiento en este nodo (incógnita); para $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^{N_{\text{dim}}}$ ($N_{\text{dim}} = 2$ para estado plano de tensiones y deformaciones, $N_{\text{dim}} = 3$ para problemas generales en 3D), $\mathbf{\Phi} \in \mathbb{R}^{N_{\text{dim}} \times N_{\text{dof}}}$ es la matriz que agrupa las funciones de forma, con $N_{\text{dof}} = N_{\text{dim}} N_{\text{nod}}$, y $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{N_{\text{dof}}}$ es el vector de desplazamientos nodales, cuyas componentes $\mathbf{u}_n = \bar{\mathbf{u}}(\mathbf{x}_n)$ se prescriben en todos los nodos $\mathbf{x}_n \in \partial\Omega_u$. Por el otro lado, las componentes incógnitas de \mathbf{U} son determinadas como solución de las ecuaciones de equilibrio:

$$\mathbf{K}^m \mathbf{U} = \mathbf{F}^m, \quad (4.2)$$

donde \mathbf{K}^m y \mathbf{F}^m son las matrices de rigidez global y el vector de carga nodales, respectivamente, dados por

$$\mathbf{K}^m = \int_{\Omega} [\mathbf{B}^m]^T \mathbb{C} \mathbf{B}^m dV, \quad (4.3)$$

$$\mathbf{F}^m = \int_{\partial\Omega_t} \mathbf{\Phi}^T \bar{\mathbf{t}} dS + \int_{\Omega} \mathbf{\Phi}^T \mathbf{b} dV, \quad (4.4)$$

con \mathbf{B}^m como matriz de tensión/desplazamiento, \mathbb{C} como los módulos elásticos efectivos, y \mathbf{b} como las fuerzas de cuerpo. El sistema algebraico lineal de ecuaciones (4.2) es la versión de MEF de las ecuaciones de equilibrio para sólidos elásticos lineales, cuya solución es ampliamente detallada en la literatura (ver por ejemplo el libro de [Zienkiewicz y Taylor \(2000\)](#) en los fundamentos de MEF).

Ahora, si la inclusión Ω_{incl} se rodea por un dispositivo Ω_{disp} , y se deja que la microestructura en cada elemento finito $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{disp}}$ sea caracterizada por N_{par} parámetros escalares agrupados en el vector $\mathbf{p}^{(e)}$, cualquier propiedad efectiva del material en $\Omega^{(e)}$ puede representarse como una función de $\mathbf{p}^{(e)}$, como por ejemplo los módulos elásticos $\mathbb{C} = \mathbb{C}(\mathbf{p}^{(e)})$. De esta manera, la microestructura en todo el dispositivo es caracterizada ahora por el vector \mathbf{P} formado por todos los parámetros $\mathbf{p}^{(e)}$ de todos los N_{disp} elementos finitos en el dispositivo Ω_{disp} , entonces $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N_{\text{var}}}$ con $N_{\text{var}} = N_{\text{par}} N_{\text{disp}}$. Consecuentemente, siendo $\mathbf{K}^m = \mathbf{K}^m(\mathbf{P})$ en las ecuaciones de equilibrio (4.2), inmediatamente surge que \mathbf{u} en cualquier $\mathbf{x} \in \Omega$ depende de \mathbf{P} , es decir $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{P})$.

4.1.2. Manipulación del campo de desplazamientos como solución de un problema de optimización

Se supone ahora que se quiere esconder la inclusión Ω_{incl} de la Figura 4.1. Para lograrlo, es necesario manipular el campo de desplazamientos en Ω de tal manera de recuperar el campo original previo a la introducción de la inclusión, en particular, recuperar \mathbf{u}_0 en una región $\Omega_{\text{cloak}} = \Omega \setminus (\Omega_{\text{disp}} \cup \Omega_{\text{incl}})$. De esa forma, un observador en Ω_{cloak} no va a detectar la presencia de la inclusión. Manipulando ahora de cierta manera la distribución de microestructura en Ω_{disp} , se intenta buscar \mathbf{P} tal que $\mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{P}) = \mathbf{u}_0(\mathbf{x})$ para todo $\mathbf{x} \in \Omega_{\text{cloak}}$.

Para asegurar que el problema puede ser numéricamente resuelto, en vez de chequear el cumplimiento de la tarea en todos los puntos $\mathbf{x} \in \Omega_{\text{cloak}}$, se lo hace en los N_{cont} predefinidos puntos de control $\bar{\mathbf{x}}^{(i)} \in \Omega_{\text{cloak}}$. Así, la forma discreta del problema de manipulación de desplazamientos puede definirse como: encontrar $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N_{\text{disp}}}$ tal que

$$\mathbf{u}(\bar{\mathbf{x}}^{(i)}, \mathbf{P}) = \mathbf{u}_0(\bar{\mathbf{x}}^{(i)}), \quad i = 1, \dots, N_{\text{cont}}. \quad (4.5)$$

Además, notar que no todo $\mathbf{p}^{(e)} \in \mathbb{R}^{N_{\text{par}}}$ define una microestructura admisible, lo cual restringe la búsqueda de \mathbf{P} a un conjunto de diseño factible $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^{N_{\text{disp}}}$. En general, no va a ser posible cumplir exactamente la tarea de manipulación de desplazamientos (4.5) buscando \mathbf{P} en el conjunto \mathcal{D} . Por lo tanto, con el fin de obtener un diseño óptimo, se propone resolver el siguiente problema de optimización no lineal con restricciones:

$$\min_{\mathbf{P} \in \mathcal{D}} f_{\text{obj}}(\mathbf{P}), \quad (4.6)$$

donde \mathbf{P} juega el rol de variables de diseño, N_{disp} es el número de variables de diseño, y f_{obj} es la función objetivo, definida como

$$f_{\text{obj}} = \sqrt{\frac{1}{N_{\text{cont}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{cont}}} \|\mathbf{u}(\bar{\mathbf{x}}^{(i)}, \mathbf{P}) - \mathbf{u}_0(\bar{\mathbf{x}}^{(i)})\|^2}, \quad (4.7)$$

la cual representa la raíz del error cuadrático medio (RMSE) en el cumplimiento de la tarea (4.5).

Utilizando el presente enfoque, es posible recuperar completamente el campo de desplazamientos \mathbf{u}_0 en Ω_{cloak} si el dominio factible de diseño \mathcal{D} es lo suficientemente rico. Si no lo fuera, se obtiene un dispositivo para el cual el error en el cumplimiento de la tarea alcanza un mínimo.

4.1.3. Definición de metamaterial para deformación plana

Como metamaterial se utiliza nuevamente un laminado formado por dos materiales isótropos (Material A y B). La microestructura en cualquier elemento finito $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{disp}}$ está completamente caracterizada por $\mathbf{p}^{(e)} = [t_A^{(e)} \theta^{(e)}]$, siendo $t_A^{(e)}$ el espesor relativo de la lámina de Material A y $\theta^{(e)}\pi$ la orientación del laminado; notar que el espesor relativo del Material B es $t_B = 1 - t_A^{(e)}$, ya que Elemento de Volumen Representativo (RVE) se considera unitario (ver Figura 4.2). Aunque todos estos materiales son isótropos, el laminado Material A/Material B es marcadamente anisótropo. En cada elemento finito, se adopta el marco Cartesiano local $\lambda\tau z$ como referencia, con τ normal al laminado, λ y τ sobre el plano xy , y z es la dirección de deformación nula. Las componentes tensoriales relevantes de las propiedades efectivas referidas al marco $\lambda\tau z$ son listadas en la Tabla 4.1. Expresiones analíticas para bi-laminados sujetos a tensión plana fueron obtenidas por Vasiliev y Morozov (2013) utilizando un análisis micromecánico. Siguiendo estos autores, se derivan las presentes expresiones analíticas para deformación plana. Cuando las mismas se refieren al marco local $\lambda\tau z$, todas las propiedades físicas del bi-laminado dependen del espesor relativo de las láminas, es decir, de t_A y t_B . La dependencia con la orientación $\theta^{(e)}$ se introduce cuando estas propiedades son referidas a los ejes Cartesianos xyz .

Tabla 4.1: Propiedades mecánicas efectivas de un laminado formado por materiales A y B referidas al marco Cartesiano local $\lambda\tau z$.

Módulos elásticos	$C_{\lambda\lambda\lambda\lambda} = E_\lambda(1 - \nu_{\lambda\tau}\nu_{\tau\lambda})[1 - \nu_{\lambda z}^2 - 2\nu_{\lambda\tau}\nu_{\tau\lambda}(1 + \nu_{\lambda z})]^{-1}$ $C_{\tau\tau\tau\tau} = E_\tau(1 - \nu_{\lambda z})(1 - 2\nu_{\lambda\tau}\nu_{\tau\lambda} - \nu_{\lambda z})^{-1}$ $C_{\lambda\lambda\tau\tau} = E_\tau\nu_{\lambda\tau}(1 - 2\nu_{\lambda\tau}\nu_{\tau\lambda} - \nu_{\lambda z})^{-1}$ $C_{\lambda\tau\lambda\tau} = G_{\lambda\tau}$
Módulos de Young	$E_\lambda = [E_A t_A(1 - \nu_A^2)^{-1} + E_B t_B(1 - \nu_B^2)^{-1}](1 - \nu_{\lambda z}^2)$ $E_\tau = [(1 - 2\nu_A)(1 + \nu_A)t_A(E_A(1 - \nu_A))^{-1} \dots$ $+ (1 - 2\nu_B)(1 + \nu_B)t_B(E_B(1 - \nu_B))^{-1} + 2\nu_{\lambda\tau}^2(E_\lambda(1 - \nu_{\lambda z}))^{-1}]^{-1}$
Coefficientes de Poisson	$\nu_{\lambda z} = [E_A t_A \nu_A(1 - \nu_A^2)^{-1} + E_B t_B \nu_B(1 - \nu_B^2)^{-1}][E_A t_A(1 - \nu_A^2)^{-1}$ $+ E_B t_B(1 - \nu_B^2)^{-1}]^{-1}$ $\nu_{\lambda\tau} = [\nu_A t_A(1 - \nu_A)^{-1} + \nu_B t_B(1 - \nu_B)^{-1}](1 - \nu_{\lambda z})$ $\nu_{\tau\lambda} = \nu_{\lambda\tau} E_\tau E_\lambda^{-1}$
Módulo de corte	$G_{\lambda\tau} = G_A G_B (t_A G_B + t_B G_A)^{-1}$

4.2. Metadispositivos para manipulación del campo de desplazamientos

4.2.1. Camuflaje mecánico

Se intenta recuperar el campo de desplazamientos que existía en un dominio Ω , previo a la introducción de una inclusión Ω_{incl} , de forma tal que no se detecte la presencia de la misma. Este concepto no es otra cosa más que la definición de camuflaje, y puede hacerse una analogía con lo desarrollado en la Sección 3.2.2, en donde se intenta recuperar el campo de temperatura original con el objetivo de que no se detecte la presencia del dispositivo bloqueador de flujo térmico. En el siguiente ejemplo se pretende diseñar un dispositivo que permita camuflar la presencia de un agujero que se realiza sobre una placa de un material determinado.

Se aplica así el diseño basado en optimización para diseñar un dispositivo para camuflaje mecánico similar al diseñado por Bückmann et al. (2015), pero que utiliza el enfoque basado en reticulados, el cual se aplica solamente a materiales cuya estructura interna está formada por esos reticulados, y en donde se intenta encontrar la geometría adecuada de los mismos para lograr la tarea deseada de camuflaje.

De esta manera, dada una placa agujereada Ω hecha de nylon, y comprimida por una carga de 100 kN/m aplicada en dos caras opuestas (ver Figura 4.2), el problema consiste en camuflar el agujero Ω_{incl} utilizando un anillo (dispositivo) que ocupa la región Ω_{disp} . Como materiales candidatos para el laminado (metamaterial), se eligen dos materiales isótropos: aluminio como Material A, con módulo de Young $E = 69$ GPa, coeficiente de Poisson $\nu = 0.32$ y módulo de corte $G = 26.14$ GPa, y politetrafluoroetileno (PTFE) como Material B, con $E = 0.5$ GPa, $\nu = 0.4$ y $G = 0.18$ GPa. Las rigideces de estos materiales son sensiblemente diferentes que la del material base (el nylon tiene $E = 3$ GPa, $\nu = 0.4$ y $G = 1.07$ GPa).

La placa Ω se asume que está bajo un estado de deformación plana y se modela utilizando una malla de 200×200 elementos finitos bilineales. Considerando la misma pero sin agujero, la solución de MEF para el campo de desplazamientos, es decir \mathbf{u}_0 , es la dada en las Figuras 4.4b y c. Ahora, si se tiene en cuenta el agujero Ω_{incl} y se descartan los elementos finitos que quedan dentro de Ω_{incl} , la solución de MEF para los desplazamientos, es decir $\mathbf{u}_{\text{nocloak}}$, es la mostrada en las Figuras 4.4e y f, y el error en el cumplimiento de la tarea de camuflaje es $\text{RMSE}_{\text{nocloak}} = 1.576 \text{ mm} = 0.531 \text{ máx} \|\mathbf{u}_0\|$, con $\text{máx} \|\mathbf{u}_0\| = 2.970 \text{ mm}$.

Ambas mallas (sin y con agujero) son estructuradas e idénticas, aunque difieren en el número de elementos. Para lograr la malla con agujero, se eliminan los elementos correspondientes al agujero (de la malla original) y luego se renumeran los nodos y elementos de la nueva malla

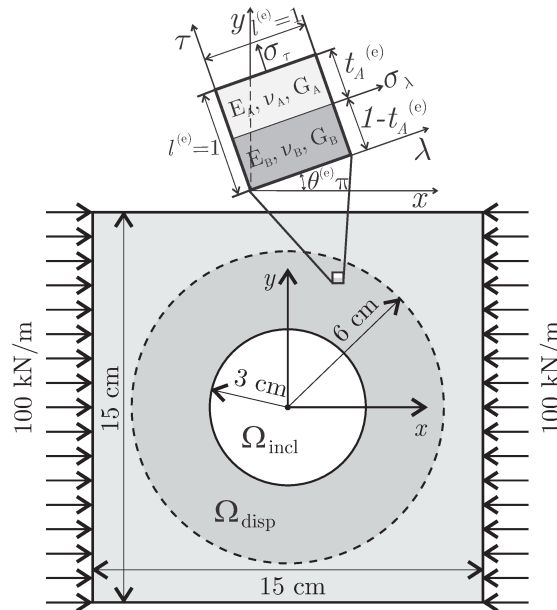


Figura 4.2: Geometría y carga para el ejemplo de camuflaje mecánico bajo un solo estado de carga.

resultante. En la Figura 4.3 se pueden observar ambas mallas.

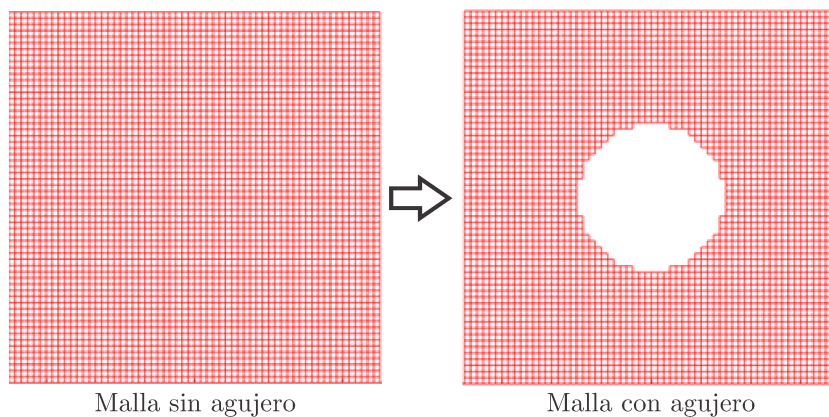


Figura 4.3: Malla de elementos finitos para la placa sin y con agujero.

Problema de optimización

Se busca ahora diseñar un dispositivo Ω_{disp} alrededor del agujero Ω_{incl} , tal que los desplazamientos se aproximen a \mathbf{u}_0 en todos los $N_{\text{cont}} = 19968$ nodos exteriores a Ω_{disp} . Utilizando la metodología propuesta, se busca cumplir la tarea de camuflaje con un mínimo de error resolviendo el problema de optimización (4.6) con las variables de diseño \mathbf{P} definiendo el material en todos los $N_{\text{disp}} = 15084$ elementos finitos cuyos centros se encuentran en Ω_{disp} . Cada elemento de ese dominio tiene un solo punto de muestreo de la microestructura (representada por el RVE de la Figura 4.2), es decir, en cada elemento finito se tienen dos microparámetros ($\mathbf{p}^{(e)} = [t_A^{(e)} \theta^{(e)}]$) que definen las propiedades efectivas en ese elemento (ver Sección 4.1.3). Notar que el vector \mathbf{P}

contiene como variables solo los vectores $\mathbf{p}^{(e)}$ que caracterizan la microestructura en los elementos de Ω_{disp} , con $P_{2e-1} = p_1^{(e)} = t_A^{(e)}$ y $P_{2e} = p_2^{(e)} = \theta^{(e)}$, $e = 1, 2, \dots, N_{\text{disp}}$. Así, el número total de variables de diseño es $N_{\text{var}} = 2N_{\text{disp}} = 30168$.

Para el metamaterial definido en la Sección 4.1.3, el presente problema de optimización esta sujeto a las siguientes restricciones de caja:

$$0 \leq P_{2e-1} = t_A^{(e)} \leq 1, \quad (4.8)$$

$$0 \leq P_{2e} = \theta^{(e)} \leq 1, \quad \text{con } e = 1, \dots, N_{\text{disp}}. \quad (4.9)$$

Como punto inicial se toma $t_A^{(e)} = \theta^{(e)} = 0.5$ en todos los elementos de Ω_{disp} . El problema de optimización no lineal con restricciones (4.6) se resuelve utilizando nuevamente IPOPT (Wächter y Biegler, 2006). Como sugiere Sigmund (2007), se utiliza también un filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001) para no obtener soluciones con checkerboard.

Resultados

Las Figuras 4.4(g.1) y (g.2) muestran la distribución calculada óptima de microparámetros en el dispositivo camuflador (espesor de Material A y orientación de las láminas respectivamente), la cual hace que el campo de desplazamientos sea el representado por las Figuras 4.4h e i, con $\text{RMSE} = 0.00128 \text{ RMSE}_{\text{nocloak}}$.

Considerando la medida del error en el cumplimiento de la tarea propuesta en el trabajo de Bückmann et al. (2015), la cual es

$$\Delta = \frac{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_{\text{cont}}} \|\mathbf{u}(\bar{\mathbf{x}}^{(i)}, \mathbf{P}) - \mathbf{u}_0(\bar{\mathbf{x}}^{(i)})\|^2}}{\sqrt{\sum_{i=1}^{N_{\text{cont}}} \|\mathbf{u}_0(\bar{\mathbf{x}}^{(i)})\|^2}} \times 100, \quad (4.10)$$

se obtiene $\Delta = 0.11\%$ para el dispositivo diseñado. Este es un excelente valor de performance comparado con el obtenido por Bückmann et al. (2015), el cual es $\Delta \approx 20\%$. Esto comprueba nuevamente el buen funcionamiento de la metodología de diseño computacional de metamateriales basada en optimización, en comparación con las metodologías clásicas de diseño de estos materiales.

La gran diferencia de error entre el dispositivo de Bückmann et al. (2015) y el diseñado por optimización es que el primero se basa en transformación de coordenadas, en donde se necesitan propiedades de materiales extremas imposibles de lograr en la realidad. Sin embargo, para ser justos, el dispositivo de Bückmann et al. (2015) permite camuflar un agujero sujeto a esfuerzos que resultan de cargas externas aplicadas en cualquier dirección. En cambio, el presente dispositivo

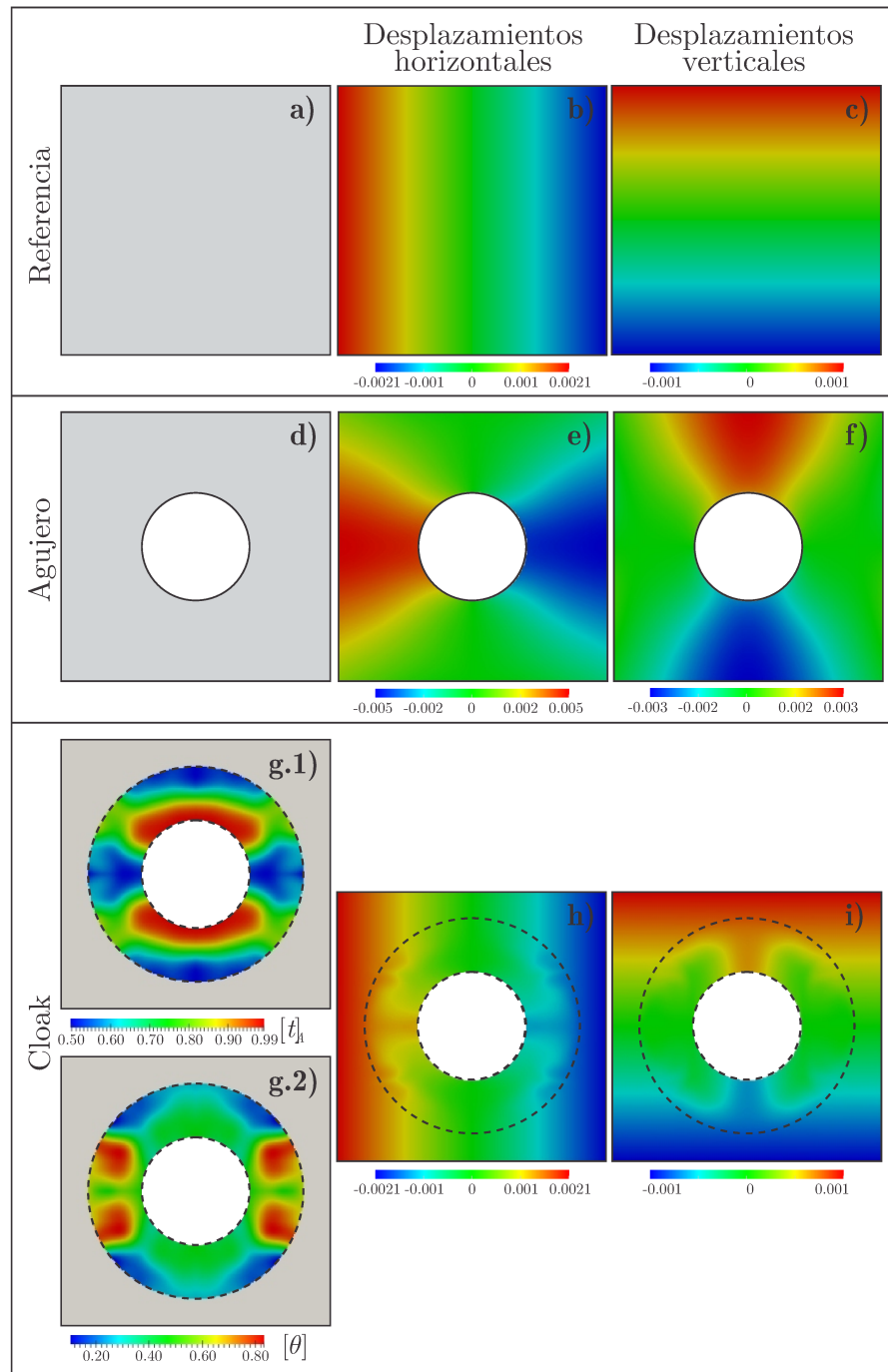


Figura 4.4: Caso de una sola carga. Distribución de material y desplazamientos para la placa homogénea sin agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado; los desplazamientos están en metros.

basado en optimización, solo logra camuflaje para las cargas con las que fue diseñado. Por último, no se podría afirmar que ambos problemas son comparables, sin embargo, se utilizó como comparación el dispositivo de [Bückmann et al. \(2015\)](#) porque hasta el momento han sido los únicos en encontrar una distribución de propiedades (y la forma de materializarla) que permite lograr camuflaje mecánico en régimen estático.

4.2.2. Camuflaje termo-mecánico

Sea nuevamente Ω un cuerpo hecho de un material arbitrario, y \mathbf{u}_0 el campo de desplazamientos en Ω como consecuencia de ciertas condiciones de borde térmicas y mecánicas. Cuando el material en una región $\Omega_{\text{incl}} \in \Omega$ se reemplaza por otro con una marcada diferencia de conductividad térmica, rigidez y/o expansión térmica, el campo de desplazamientos en Ω se ve significativamente afectado. Si ahora, como se hizo en la Sección 4.2.1, se desea camuflar esa inclusión, se debe diseñar un metamaterial en la región Ω_{disp} que cubra la inclusión Ω_{incl} de tal forma que el campo de desplazamientos resultante \mathbf{u} se asemeje a \mathbf{u}_0 en una región determinada $\Omega_{\text{cloak}} \in \Omega$.

Asumiendo un comportamiento termo-elástico lineal y pequeñas deformaciones, el campo de desplazamientos en Ω está gobernado por la ecuación de equilibrio

$$\text{div } \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{b} = \mathbf{0}, \quad (4.11)$$

donde \mathbf{b} son las fuerzas de cuerpo, y $\boldsymbol{\sigma}$ el tensor de tensiones de Cauchy definido por

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C} : [\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\alpha} (T - T_{\text{ref}})],$$

siendo $\boldsymbol{\varepsilon} = [\text{grad } \mathbf{u} + (\text{grad } \mathbf{u})^T]/2$ el tensor de deformaciones infinitesimales, \mathbb{C} nuevamente el tensor de módulos elásticos, $\boldsymbol{\alpha}$ el tensor de expansión térmica, T la temperatura y T_{ref} la temperatura para deformación térmica nula. La dependencia de \mathbf{u} respecto de T obliga el acople de la ecuación de equilibrio (4.11) con la de conducción de calor

$$\text{div} (\mathbf{k} \text{ grad } T) + s = 0. \quad (4.12)$$

Aquí, este problema termomecánico acoplado se resuelve utilizando nuevamente MEF, como se detalla en el artículo de Fachinotti et al. (2015c). Con Ω dividida en elementos finitos, la microestructura en cada elemento $\Omega^{(e)}$ en la región Ω_{disp} se caracteriza por el vector $\mathbf{p}^{(e)}$ de microparámetros. Consecuentemente, cualquier propiedad material efectiva en $\Omega^{(e)}$ es una función de $\mathbf{p}^{(e)}$, como es el caso de la conductividad térmica, la expansión térmica y el módulo elástico. Acoplar los campos térmicos con la respuesta mecánica del dominio introduce una complicación adicional en el diseño de metamateriales basado en optimización. A pesar de que el problema de optimización se define solo en términos del campo de desplazamientos, el cumplimiento de la tarea de camuflaje se va a ver afectado por la dependencia de los desplazamientos y la temperatura con respecto a la distribución de microparámetros. El presente enfoque puede verse como una generalización de lo propuesto por Sigmund y Torquato (1996) para el diseño de metama-

teriales con características extremas de expansión térmica, donde solo las propiedades mecánicas son consideradas, ya que la distribución de temperatura siempre está prescrita independientemente de la inhomogeneidad en la conductividad térmica. Notar que el problema resuelto por Sigmund y Torquato (1996) no involucra ni el acople entre el equilibrio de fuerzas y las ecuaciones de conducción de calor, ni la dependencia de la temperatura con los microparámetros. Sin embargo, estos aspectos son tenidos en cuenta en el presente problema termomecánico acoplado. De esta manera, dada la placa agujereada Ω de la Figura 4.5, hecha de nylon, con condiciones de borde térmicas y mecánicas (fuerzas externas y temperaturas impuestas), y despreciando las fuerzas de cuerpo, se pretende camuflar el agujero Ω_{incl} utilizando un anillo (dispositivo) que ocupa la región Ω_{disp} . El presente dominio de análisis tiene las mismas proporciones que el de la Sección 4.2.1, pero sus medidas absolutas han sido incrementadas para que el efecto de la temperatura sobre las deformaciones sea más acentuado.

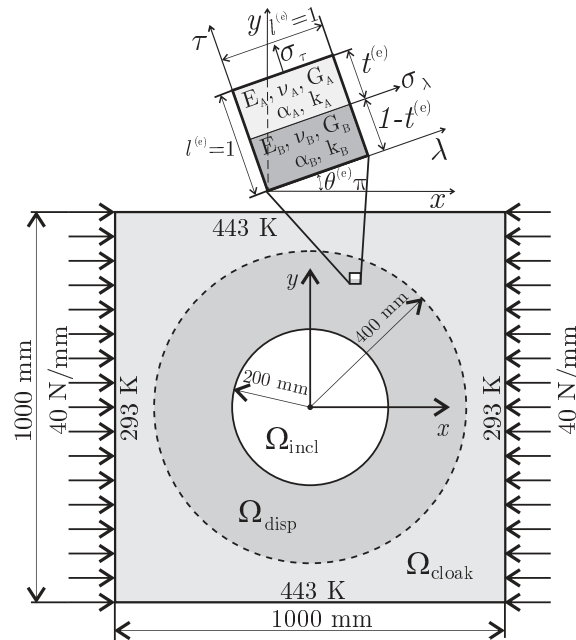


Figura 4.5: Dominio $\Omega = \Omega_{cloak} \cup \Omega_{disp} \cup \Omega_{incl}$ y condiciones de borde del problema termo-mecánico. Arriba, el Elemento de Volumen Representativo (RVE) caracterizando la microestructura en el dispositivo Ω_{disp} .

Como metamaterial del dispositivo, se utiliza nuevamente un laminado formado por dos materiales isotrópicos (Material A y B). Al igual que en la Sección 4.1.3, la microestructura en cualquier elemento finito $\Omega^{(e)} \in \Omega_{disp}$ está completamente caracterizada por $\mathbf{p}^{(e)} = [t_A^{(e)} \theta^{(e)}]$ (representada por el RVE de la Figura 4.5). De esta manera, las propiedades mecánicas efectivas del laminado respecto de los ejes locales $\lambda\tau z$ son las ya definidas en la Tabla 4.1. Ahora, si también se tienen en cuenta las propiedades térmicas efectivas, en la Tabla 4.2 puede verse la dependencia de la conductividad y de la expansión térmica con respecto a $t_A^{(e)}$ (referidas a los ejes locales del laminado). La primera dependencia es análoga a la de la Sección 3.1.3, y la segunda fue obtenidas

también utilizando un análisis micromecánico análogo al de Vasiliev y Morozov (2013). Luego, la dependencia con la orientación $\theta^{(e)}$ se introduce cuando estas propiedades son referidas a los ejes Cartesianos xyz .

Tabla 4.2: Propiedades térmicas efectivas de un laminado formado por materiales A y B referidas al marco Cartesiano local $\lambda\tau z$.

Conductividad térmica	$k_{\lambda\lambda} = t_A k_A + t_B k_B$ $k_{\tau\tau} = k_A k_B (t_A k_B + t_B k_A)^{-1}$
Expansión térmica	$\alpha_{\lambda\lambda} = [\alpha_A E_A t_A (1 - \nu_A)^{-1} + \alpha_B E_B t_B (1 - \nu_B)^{-1}] (1 - \nu_{\lambda z}) E_\lambda^{-1}$ $\alpha_{\tau\tau} = \alpha_A t_A (1 + \nu_A) (1 - \nu_A)^{-1} + \alpha_B t_B (1 + \nu_B) (1 - \nu_B)^{-1}$ $- 2\nu_{\lambda\tau} \alpha_{\lambda\lambda} (1 - \nu_{\lambda z})^{-1}$

Como materiales A y B para este ejemplo se eligen ahora aluminio y polietileno, y además se considera que el módulo de Young de estos materiales depende de la temperatura. Lo mismo para el material base (nylon). Las funciones que relacionan el módulo de Young con la temperatura se obtienen de una regresión no lineal de las funciones reportadas en las referencias de la Tabla 4.3. El resto de las propiedades térmicas y mecánicas se mantienen constantes, con los valores mostrados en la Tabla 4.4. Es importante destacar que aun si estas propiedades se mantienen constantes para cada material constituyente del laminado, la sola dependencia del módulo de Young con la temperatura genera cambios en todas las propiedades mecánicas efectivas listadas en las Tablas 4.1 y 4.2.

Tabla 4.3: Dependencia del módulo de Young (en GPa) con la temperatura tanto para el nylon, aluminio y polietileno.

	Nylon (Shibukawa et al., 1962)	Aluminio (Hopkins et al., 2012)	Polietileno (Govaert et al., 1992)
2.334	$1.208 - (1 + e^{-0.141T+48.5})^{-1}$	$E_A = -0.04T + 80$	$E_B = 136.155 e^{-0.0161T}$

Tabla 4.4: Propiedades térmicas y mecánicas del nylon, aluminio y polietileno.

Propiedad	Nylon	Aluminio	Polietileno
Cond. térm. ($\text{Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$)	0.31	$k_A = 205$	$k_B = 0.46$
Coefficientes de Poisson	0.4	$\nu_A = 0.32$	$\nu_B = 0.46$
Mód. de corte (GPa)	$E/(2 + 2 * \nu)$	$G_A = E_A/(2 + 2 * \nu_A)$	$G_B = E_B/(2 + 2 * \nu_B)$
Expansión térmica (K^{-1})	8×10^{-5}	$\alpha_A = 2.3 \times 10^{-5}$	$\alpha_B = 15 \times 10^{-5}$

La placa Ω se asume que está bajo un estado de deformación plana, y dada la simetría del dominio y de las condiciones de borde, solo un cuarto de Ω con $x \geq 0$ y $y \geq 0$ es modelado utilizando una malla de 100×100 elementos finitos bilineales. El campo de desplazamientos \mathbf{u} se

determina resolviendo la ecuación de equilibrio (4.11) luego de resolver la ecuación de conducción del calor (4.12) (la que genera el campo de temperaturas T). Ambas ecuaciones son resueltas utilizando MEF.

Considerando la placa de nylon sin el agujero, la solución de MEF para el campo de desplazamientos, esto es \mathbf{u}_0 , es la que se observa en las Figuras 4.6b y c; notar que $\max \|\mathbf{u}_0\| = 9.19$ mm. Para la placa con el agujero (Ω_{incl}), sin el dispositivo camuflador, el campo de desplazamientos es el mostrado en las Figuras 4.6f y g, y el error en el cumplimiento de la tarea de camuflaje es $\text{RMSE}_{\text{nocloak}} = 4.02$ mm = $0.44 \max \|\mathbf{u}_0\|$.

Problema de optimización

Se busca así diseñar un dispositivo Ω_{disp} alrededor del agujero Ω_{incl} , tal que los desplazamientos se aproximen a \mathbf{u}_0 en todos los nodos exteriores a Ω_{disp} . Para ello se resuelve el problema de optimización (4.6) con las variables de diseño $\mathbf{p}^{(e)} = [t_A^{(e)} \theta^{(e)}]$ en cada elemento finito de Ω_{disp} y agrupadas en el vector \mathbf{P} . Como restricciones de caja se utilizan las mismas que en la Sección 4.2.1, y para el punto inicial se toma $t_A^{(e)} = \theta^{(e)} = 0.5$. El problema de optimización no lineal con restricciones (4.6) se resuelve utilizando nuevamente IPOPT (Wächter y Biegler, 2006). Como sugiere Sigmund (2007), se utiliza también un filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001) para no obtener checkerboard.

Análisis de sensibilidad

Nuevamente, para una resolución eficiente del problema de optimización (4.6), se requiere el cálculo analítico de la derivada de la función objetivo con respecto a las variables de diseño (df/dP_i). Se utiliza nuevamente el método adjunto, y de esta manera la función objetivo puede reescribirse como (Chen y Tong, 2005a):

$$f(\mathbf{P}) = f(\mathbf{P}) - \boldsymbol{\xi}^T (\mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{F}) - \boldsymbol{\lambda}^T (\mathbf{K}^m \mathbf{U} - \mathbf{F}^m), \quad (4.13)$$

donde los términos adicionales son nulos en virtud de las Ecuaciones de balance de MEF (3.6) y (4.2). A diferencia del ejemplo puramente mecánico de la Sección anterior 4.2.1, el vector de carga nodales \mathbf{F}^m se redefine para tener en cuenta esfuerzos termo-mecánicos. De esta manera se obtiene:

$$\mathbf{F}^m = \int_{\partial\Omega_t} \boldsymbol{\Phi}^T \bar{\mathbf{t}} dS + \int_{\Omega} \boldsymbol{\Phi}^T \mathbf{b} dV - \int_{\Omega} [\mathbf{B}^m]^T \boldsymbol{\alpha} (T - T_{\text{ref}}) dV = \mathbf{F}^t + \mathbf{F}^b - \mathbf{F}^{\text{Th}}, \quad (4.14)$$

donde aparece el término adicional \mathbf{F}^{Th} correspondiente a los esfuerzos térmicos. Así, la derivada (4.13) con respecto a la componente i^{th} de \mathbf{P} está dada por:

$$\frac{df}{dP_i} = \frac{\partial f}{\partial P_i} + \frac{\partial f}{\partial \mathbf{U}} \frac{d\mathbf{U}}{dP_i} - \boldsymbol{\xi}^T \left(\frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_i} \mathbf{T} + \mathbf{K} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} + \hat{\mathbf{K}} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \right) - \boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathbf{K}^m}{\partial P_i} \mathbf{U} + \mathbf{K}^m \frac{d\mathbf{U}}{dP_i} + \hat{\mathbf{K}}^m \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} + \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{Th}}}{\partial P_i} + \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{Th}}}{\partial \mathbf{T}} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \right), \quad (4.15)$$

donde $\hat{\mathbf{K}}$ tiene componentes $\hat{K}_{jkl} = (\partial K_{jl} / \partial T_k) T_l$, mientras que las componentes de $\hat{\mathbf{K}}^m$ son $\hat{K}_{jkl}^m = (\partial K_{jl}^m / \partial T_k) T_l$. Los términos en (4.15) puede reacomodarse como:

$$\frac{df}{dP_i} = \frac{\partial f}{\partial P_i} + \left(\frac{\partial f}{\partial \mathbf{U}} - \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{K}^m \right) \frac{d\mathbf{U}}{dP_i} - \left[\boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathbf{F}^{\text{Th}}}{\partial \mathbf{T}} + \hat{\mathbf{K}}^m \right) + \boldsymbol{\xi}^T \left(\mathbf{K} + \hat{\mathbf{K}} \right) \right] \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} - \boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathbf{K}^m}{\partial P_i} \mathbf{U} + \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{Th}}}{\partial P_i} \right) - \boldsymbol{\xi}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_i} \mathbf{T}. \quad (4.16)$$

De forma tal de evitar el costo computacional de calcular $d\mathbf{T}/dP_i$ y $d\mathbf{U}/dP_i$, los vectores adjuntos se determinan resolviendo:

$$\mathbf{K}^m \boldsymbol{\lambda} = \frac{\partial f}{\partial \mathbf{U}}^T, \quad (4.17)$$

y

$$\left(\mathbf{K} + \hat{\mathbf{K}} \right)^T \boldsymbol{\xi} = - \left(\frac{\partial \mathbf{F}^{\text{Th}}}{\partial \mathbf{T}} + \hat{\mathbf{K}}^m \right)^T \boldsymbol{\lambda}. \quad (4.18)$$

De esta manera, la sensibilidad de la función objetivo con respecto a los microparámetros puede calcularse como:

$$\frac{df}{dP_i} = \frac{\partial f}{\partial P_i} - \boldsymbol{\lambda}^T \left(\frac{\partial \mathbf{K}^m}{\partial P_i} \mathbf{U} + \frac{\partial \mathbf{F}^{\text{Th}}}{\partial P_i} \right) - \boldsymbol{\xi}^T \frac{\partial \mathbf{K}}{\partial P_i} \mathbf{T}. \quad (4.19)$$

Este cálculo de la sensibilidad se determinó considerando propiedades térmicas y mecánicas termo-dependientes, lo que introduce una pequeña modificación en la metodología propuesta por Chen y Tong (2005b), en donde esa dependencia con la temperatura no era tenida en cuenta.

Resultados

Las Figuras 4.6(i.1) y (i.2) muestran la distribución calculada óptima de microparámetros en el dispositivo camuflador (espesor de Material A y orientación de las láminas respectivamente), la cual hace que el campo de desplazamientos sea el representado por las Figuras 4.6j y k, con $\text{RMSE} = 0.017 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}$. A su vez, en las Figuras 4.6d, h y l pueden observarse los campos de temperatura resultantes tanto para la placa de nylon sin agujero, con agujero, y con el metadispositivo respectivamente.

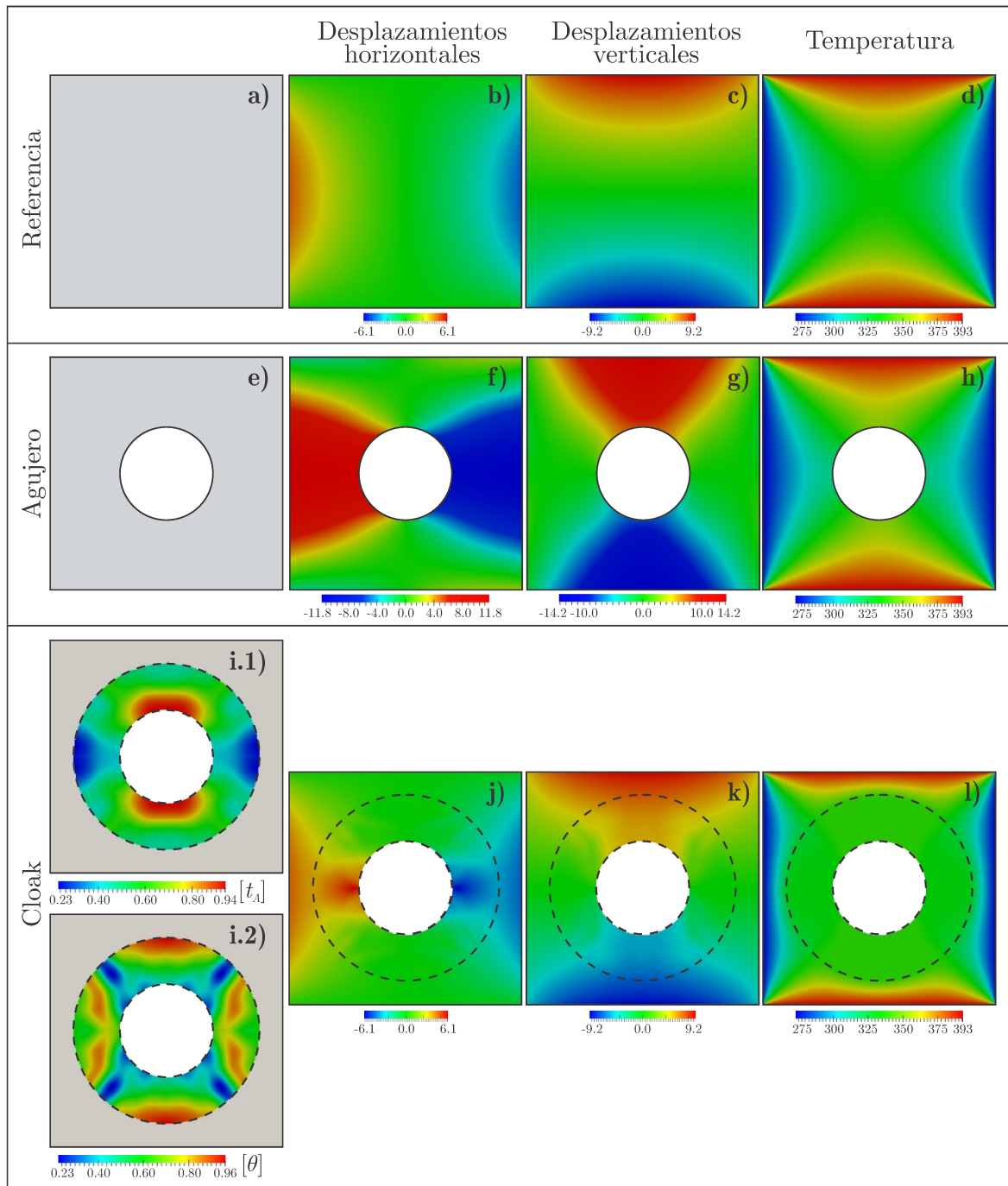


Figura 4.6: Caso de una sola carga. Distribución de material y desplazamientos para la placa homogénea sin agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado; los desplazamientos están en milímetros.

4.3. Fabricabilidad en el diseño de materiales mecánicos

En la Sección 4.2 se aplica el diseño basado en optimización para diseñar metadispositivos realizables. Al igual que el enfoque basado en reticulados (Bückmann et al., 2015), esta nueva metodología prescribe directamente como fabricar el metamaterial en cada punto del metadispositivo, pero supera al método de Bückmann et al. (2015) en que no solo permite diseñar estructuras basadas en reticulados, sino que también permite realizar cualquier tipo de material cuantitativamente

caracterizable. Sin embargo, mas allá de la dificultad o imposibilidad de fabricar metamateriales anisótropos específicos, estos enfoques producen metadispositivos inhomogéneos, lo cual es también otra importante desventaja para el diseño de dispositivos practicables.

En la Sección 3.3.5 se introduce la idea de considerar que un dispositivo para manipulación térmica puede comportarse como un metamaterial a escala macro siendo fabricado con incluso unos pocos materiales isotropos. Ahora, esta forma de diseñar dispositivos de fácil fabricación para manipular campos macroscópicos se extiende a problemas elastoestáticos. Particularmente, se prueba su capacidad para diseñar dispositivos para camuflaje mecánico utilizando solamente dos materiales elásticos isotropos y homogéneos.

4.3.1. Optimización Discreta de Material (DMO)

En un amplio rango de materiales, los llamados materiales “cuantitativamente caracterizables” (Kachanov y Sevostianov, 2005), las propiedades materiales efectivas dependen de unos pocos parámetros: el espesor y orientación de láminas en laminados (Peralta et al., 2017), la densidad y los factores de irregularidad en materiales con inhomogeneidades aisladas (Kachanov y Sevostianov, 2005), el tamaño de inclusiones prismáticas en compuestos elásticos (Fachinotti et al., 2015c), la orientación de fibras en polímeros reforzados con fibras (Lund y Stegmann, 2005), o el tamaño de partículas o inclusiones en implantes dentales (Chen et al., 2013b). De esta forma, estos parámetros pueden ser las componentes del vector $\mathbf{p}^{(e)}$ en un elemento finito (al igual que en la Sección 3.3.1).

Los metamateriales diseñados utilizando el enfoque de Bückmann et al. (2015) son cuantitativamente caracterizados cuando $\mathbf{p}^{(e)}$ define la topología de la celda unitaria en el elemento $\Omega^{(e)}$. Actualmente, siguiendo el enfoque de Optimización Libre de Material (FMO) (Kocvara y Stingl, 2007), materiales de Cosserat como los diseñados utilizando el enfoque de transformación de coordenadas pueden ser representados asumiendo que las componentes de $\mathbf{p}^{(e)}$ son las propiedades efectivas del material (o sus componentes si las mismas son tensores). De esta manera, el presente enfoque basado en optimización puede tratar las demás metodologías de diseño como casos particulares.

Para facilitar la fabricación, como se hace en la Sección 3.3.1, el material en cada punto del dispositivo propuesto se selecciona de una lista predefinida de N_{cand} materiales candidatos. Luego de seleccionado los mismos, con sus correspondientes módulos elásticos efectivos \mathbb{C}_m , $m = 1, 2, \dots, N_{\text{cand}}$, el tensor elástico efectivo $\mathbb{C}^{(e)}$ en cada elemento finito $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{disp}}$ se define

por la siguiente regla de mezclas:

$$\mathbb{C}^{(e)} = \sum_{m=1}^{N_{\text{cand}}} \phi_m^{(e)} \mathbb{C}_m, \quad (4.20)$$

donde $\phi_m^{(e)}$ es la fracción del material candidato m en el elemento finito $\Omega^{(e)}$. Como el material en $\Omega^{(e)}$ debe ser uno de los candidatos y no una mezcla de ellos, $\phi_m^{(e)}$ debería tender a uno o cero. Esto hace que (4.6) sea un problema de optimización discreta, el cual es muy caro de resolver cuando el número de variables de diseño es grande (como es el caso en donde hay N_{cand} variables por elemento finito en una malla lo suficientemente fina). Es por ello que se transforma este problema de optimización discreta en uno de optimización continua, el cual puede ser resuelto eficientemente utilizando algoritmos basados en gradientes. Nuevamente, como se hizo en la Sección 3.3.1, se utiliza la técnica de DMO propuesta en (Stegmann y Lund, 2005), donde $\phi_m^{(e)}$ se define como una función continua de las variables reales $\rho_m^{(e)} \in [0, 1]$:

$$\phi_m^{(e)} = \frac{\left(\rho_m^{(e)}\right)^p \prod_{k=1, k \neq m}^{N_{\text{cand}}} \left[1 - \left(\rho_k^{(e)}\right)^p\right]}{\sum_{j=1}^{N_{\text{cand}}} \left(\rho_j^{(e)}\right)^p \prod_{k=1, k \neq j}^{N_{\text{cand}}} \left[1 - \left(\rho_k^{(e)}\right)^p\right]} \equiv \phi_m(\mathbf{p}^{(e)}), \quad (4.21)$$

con $\mathbf{p}^{(e)} = [\rho_1^{(e)}, \dots, \rho_{N_{\text{cand}}}^{(e)}]$, y $\rho_m^{(e)}$ jugando el rol de variable de diseño. Notar que el problema de optimización continua (4.6) está sujeto a las restricciones de caja $0 \leq \rho_m^{(e)} \leq 1$. Al igual que en optimización topológica (Bendsøe y Sigmund, 2003), valores intermedios de la fracción de material $\phi_m^{(e)}$ son penalizados seleccionando $p \geq 3$ en (4.21). Luego de introducir la Ecuación (4.21) dentro de la Ecuación (4.20), es aparente que los módulos efectivos en cada elemento finito $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{disp}}$ pueden expresarse como función del vector $\mathbf{p}^{(e)}$, por lo que el número de variables de diseño por elemento finito dentro del dispositivo es igual al número de materiales candidatos, es decir, $N_{\text{par}} \equiv N_{\text{cand}}$.

4.3.2. Camuflaje mecánico por DMO

Se aplica así la metodología de DMO para el diseño de un dispositivo para camuflaje mecánico como una alternativa al diseñado en la Sección 4.2.1. El dominio Ω de análisis es la misma placa agujereada de la Figura 4.2, hecha de nylon (el nylon tiene $E = 3$ GPa y $\nu = 0.4$), y comprimida por una carga de 100 kN/m aplicada en dos caras opuestas. El problema consiste en camuflar el agujero Ω_{incl} utilizando un anillo (dispositivo) que ocupa la región Ω_{disp} .

Se eligen los mismos materiales candidatos: aluminio como Material A, con módulo de Young $E = 69$ GPa y coeficiente de Poisson $\nu = 0.32$, y politetrafluoroetileno (PTFE) como Material B, con $E = 0.5$ GPa y $\nu = 0.4$.

A diferencia del ejemplo de la Sección 4.2.1, la placa Ω se asume que está bajo un estado de tensión plana. Se modela utilizando una malla de 200×200 elementos finitos bilineales. Considerando la misma pero sin agujero, la solución de MEF para el campo de desplazamientos, es decir \mathbf{u}_0 , es la dada en las Figuras 4.7b y c. Ahora, si se tiene en cuenta el agujero Ω_{incl} y se descartan los elementos finitos que quedan dentro de Ω_{incl} , la solución de MEF para los desplazamientos, es decir $\mathbf{u}_{\text{nocloak}}$, es la mostrada en las Figuras 4.7e y f, y el error en el cumplimiento de la tarea de camuflaje es $\text{RMSE}_{\text{nocloak}} = 1.845 \text{ mm} = 0.685 \text{ máx} \|\mathbf{u}_0\|$, con $\text{máx} \|\mathbf{u}_0\| = 2.693 \text{ mm}$.

Problema de optimización

Se diseña el dispositivo Ω_{disp} alrededor del agujero Ω_{incl} , tal que los desplazamientos se aproximen a \mathbf{u}_0 en todos los $N_{\text{cont}} = 19972$ nodos exteriores a Ω_{disp} . Se intenta así camuflar Ω_{incl} resolviendo el problema de optimización (4.6) con las variables de diseño \mathbf{P} definiendo el material en todos los $N_{\text{disp}} = 15086$ elementos finitos cuyos centros se encuentran en Ω_{disp} . Así, el número total de variables de diseño es $N_{\text{var}} = 2N_{\text{disp}} = 30168$. Como punto inicial se toma $\rho_1^{(e)} = \rho_2^{(e)} = 0.5$.

El problema de optimización no lineal con restricciones (4.6) se resuelve utilizando nuevamente IPOPT (Wächter y Biegler, 2006). Como sugiere Sigmund (2007), se utiliza un filtro de suavizado de densidad Heaviside, tanto para obtener soluciones sin checkerboard, como para reducir las zonas grises.

Resultados

La Figura 4.7g muestra la distribución calculada óptima de material en el dispositivo camuflador, la cual hace que el campo de desplazamientos sea el representado por las Figuras 4.7h e i, con $\text{RMSE} = 0.00417 \text{ RMSE}_{\text{nocloak}}$.

Para eliminar las zonas grises que todavía se observan en el diseño óptimo de la Figura 4.7g, se aplica un simple filtrado a posteriori de “blanco-y-negro” propuesto por Fachinotti et al. (2018a) (Sección 3.3.5): si la fracción de aluminio en un elemento es mayor que un cierto límite $\phi^* \in (0, 1)$, el elemento se asume completamente hecho de aluminio; de otra manera, se considera como PTFE. De esta manera, el dispositivo se vuelve más fácil de fabricar a expensas de deteriorar el cumplimiento de la tarea, ya que ahora la distribución de material no es más óptima. A priori, la elección natural para ϕ^* debería ser $\phi^* = 0.5$, lo que es equivalente a asumir que el material en un elemento es aquel que tiene la mayor fracción; sin embargo, el correspondiente dispositivo (Figura 4.7j) cumple de una forma pobre la tarea de camuflaje, con un $\text{RMSE} = 0.5495 \text{ RMSE}_{\text{nocloak}}$. De hecho, el menor error en la tarea de camuflaje se logra para un límite bastante bajo de ϕ^* ,

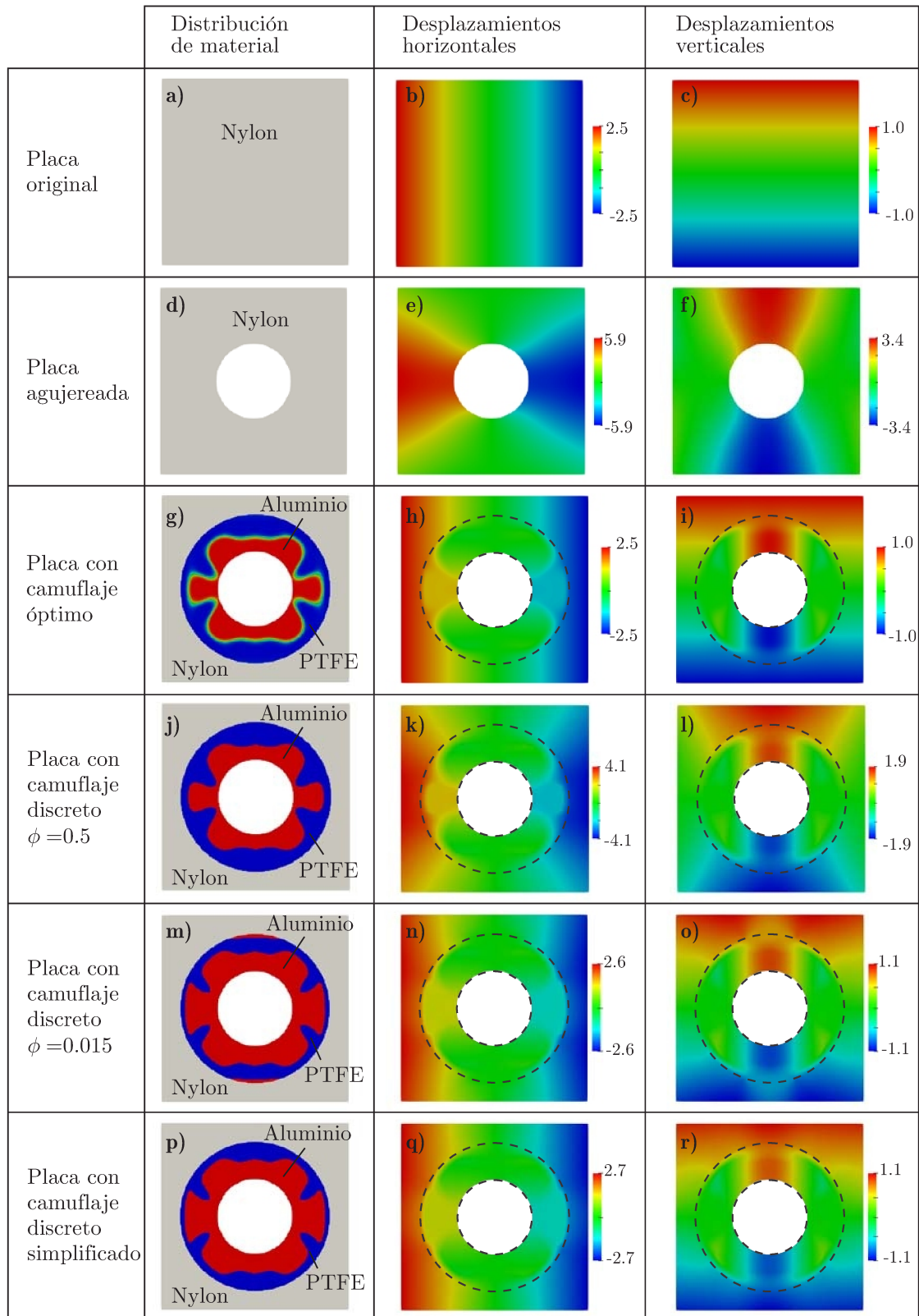


Figura 4.7: Caso de una sola carga. Distribución de material y desplazamientos para la placa homogénea sin agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado utilizando diferentes dispositivos; los desplazamientos están en milímetros.

igual a 0.015, dando lugar al dispositivo mostrado en la Figura 4.7m, para el cual se tiene un $RMSE = 0.0610 RMSE_{nocloak}$.

Por último, para una fabricación todavía más fácil, se eliminan las zonas estrechas de aluminio en la parte superior e inferior del dispositivo mostrado en la Figura 4.7m, obteniendo así el mostrado en la Figura 4.7p, el cual tiene un $\text{RMSE} = 0.0896 \text{ RMSE}_{\text{nocloak}}$. Este dispositivo tiene un núcleo de aluminio con un recubrimiento de PTFE de espesor variable, actuando el conjunto como un mecanismo flexible para camuflar el agujero.

Considerando la medida del error en el cumplimiento de la tarea (ver Ecuación (4.10)), se obtiene $\Delta = 0.40\%$ para el dispositivo diseñado. Este es un muy buen valor de performance comparado con el obtenido por Bückmann et al. (2015), el cual es $\Delta \approx 20\%$.

Extensión a múltiples cargas

Modificando la función objetivo, esta metodología permite muy fácilmente cumplir con otras tareas. Más aun, cambiar las geometrías, tanto del dispositivo como del dominio de análisis, o las condiciones de borde (cargas y desplazamientos), implica solamente modificar el modelo de elementos finitos, sin alterar en ninguna medida la metodología basada en optimización. Por lo tanto, problemas reales o ingenieriles, complejos y hasta en tres dimensiones, pueden ser directamente resueltos.

Por ejemplo, considerar múltiples cargas implica una fácil redefinición de la función objetivo. Sea $\mathbf{u}_0 = \mathbf{u}_0(\mathbf{x}, \mathbf{F}^{(\alpha)})$ el desplazamiento causado por una fuerza externa $\mathbf{F}^{(\alpha)}$ en el dominio Ω sin la inclusión, y $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x}, \mathbf{P}, \mathbf{F}^{(\alpha)})$ el desplazamiento causado por esa fuerza en Ω en presencia de la inclusión Ω_{incl} junto con el dispositivo camuflador ocupando Ω_{disp} , donde la distribución del material es definida por \mathbf{P} . En presencia de múltiples cargas $\mathbf{F}^{(1)}, \mathbf{F}^{(2)}, \dots, \mathbf{F}^{(N_{\text{carga}})}$, la función objetivo que representa el error en el cumplimiento de la tarea global de camuflaje puede ser definida como una suma ponderada de los RMSE en el cumplimiento de tareas individuales, esto es:

$$f_{\text{obj}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{carga}}} \omega_{\alpha} \sqrt{\frac{1}{N_{\text{cont}}} \sum_{i=1}^{N_{\text{cont}}} \|\mathbf{u}(\bar{\mathbf{x}}^{(i)}, \mathbf{P}, \mathbf{F}^{(\alpha)}) - \mathbf{u}_0(\bar{\mathbf{x}}^{(i)}, \mathbf{F}^{(\alpha)})\|^2}, \quad (4.22)$$

donde ω_{α} es el peso asignado al cumplimiento de la tarea para la fuerza externa $\mathbf{F}^{(\alpha)}$; típicamente, $\omega_{\alpha} = 1/N_{\text{carga}}$.

Como ejemplo de aplicación, al problema descrito previamente en la Sección 4.3.2 se le agrega una carga vertical, como se muestra en la Figura 4.8. Ahora, el camuflaje tiene que lograrse tanto para la carga horizontal (compresión en el ejemplo previo), como para la carga vertical (tracción). En la placa de nylon con agujero, es decir, sin el dispositivo camuflador, el error en el cumplimiento de la tarea global es $f_{\text{obj}} = f_{\text{nocloak}} = 1.8493 \text{ mm} = 0.6868 \text{ máx} \|\mathbf{u}_0\|$, con $\text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{hcomp}} =$

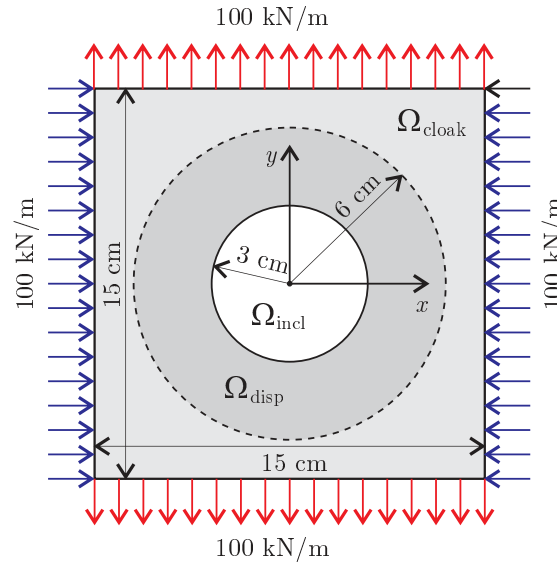


Figura 4.8: Geometría y cargas para el ejemplo de camuflaje mecánico bajo un estado de dos cargas.

0.6853 máx $\|\mathbf{u}_0\|$ para la compresión horizontal y $\text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{vtens}} = 0.6883$ máx $\|\mathbf{u}_0\|$ para la tracción vertical.

El dispositivo óptimo es el mostrado en la Figura 4.9g, para el cual $f_{\text{obj}} = 0.00212 f_{\text{nocloak}}$, $\text{RMSE}^{\text{hcomp}} = 0.00207 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{hcomp}}$, y $\text{RMSE}^{\text{vtens}} = 0.00219 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{vtens}}$. Más allá de que el dispositivo cumple la tarea de camuflaje muy bien, se ve seriamente afectado por zonas grises.

Si se define ahora un dispositivo completamente discreto asumiendo que aquellos elementos del dispositivo óptimo que tengan una fracción de aluminio mayor que ϕ^* son completamente hechos de aluminio, el mejor diseño es el obtenido para $\phi^* = 0.033$, mostrado en la Figura 4.9j, para el cual el error global es $f_{\text{obj}} = 0.1101 f_{\text{nocloak}}$, y los errores individuales son $\text{RMSE}^{\text{hcomp}} = 0.1120 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{hcomp}}$ y $\text{RMSE}^{\text{vtens}} = 0.1081 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{vtens}}$.

Ahora, para una mejor manufacturabilidad, si se eliminan de este dispositivo aquellas pequeñas áreas de PTFE adyacentes al agujero, se obtiene el dispositivo mostrado en la Figura 4.9m, siendo levemente afectado el cumplimiento de la tarea, con $f_{\text{obj}} = 0.1104 f_{\text{nocloak}}$, $\text{RMSE}^{\text{hcomp}} = 0.1124 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{hcomp}}$, y $\text{RMSE}^{\text{vtens}} = 0.1084 \text{RMSE}_{\text{nocloak}}^{\text{vtens}}$.

Es importante resaltar que, debido a la naturaleza altamente no discreta del dispositivo óptimo (Figura 4.9g), el cumplimiento de la tarea de camuflaje es considerablemente afectado por el filtrado de blanco-y-negro. Sin embargo, este es todavía satisfactorio, como puede verse cuando se calcula el error Δ (ver Ecuación (4.10)): $\Delta = 10.74\%$ para la tarea de camuflaje de la compresión horizontal, y $\Delta = 10.40\%$ para la de tracción vertical.

Notar que los desplazamientos mostrados en la Figura 4.9 son aquellos producidos por la compresión horizontal, es decir, $\mathbf{u}^{\text{hcomp}}$. Ya que los dispositivos (el óptimo como también el discreto) son prácticamente simétricos con respecto al centro de la placa, los desplazamientos producidos

por la tracción vertical, es decir $\mathbf{u}^{\text{vtens}}$, son fácilmente derivables de $\mathbf{u}^{\text{hcomp}}$: incluso, las componentes horizontal y vertical de $\mathbf{u}^{\text{vtens}}$ tienen mapas de colores casi idénticos a los mostrados en la Figura 4.9 pero con sus rangos intercambiados. No sorprende así que el presente dispositivo cumpla la tarea de camuflaje de la misma manera para ambas cargas.

Tampoco es sorprendente, y vale la pena resaltarlo, que el dispositivo diseñado para múltiples cargas cumpla la tarea de camuflaje para cada tarea individual de forma más pobre que aquel dispositivo diseñado específicamente para cada carga, como se hizo en la Sección previa 4.3.2. Por último, se comprueba nuevamente así la versatilidad del diseño computacional de materiales para diseñar dispositivos con múltiples tareas.

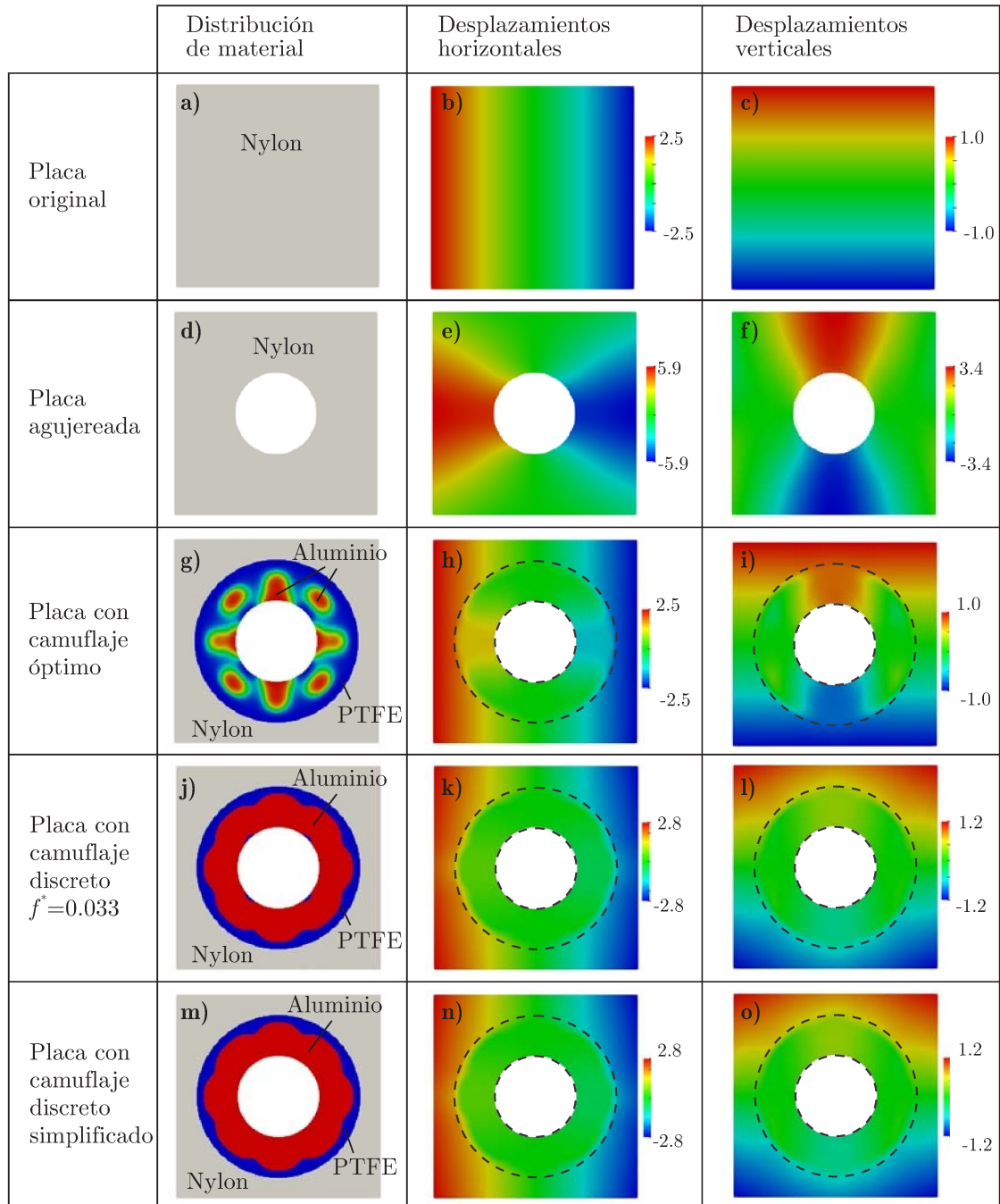


Figura 4.9: Caso de múltiples cargas. Distribución de material y desplazamientos bajo el estado de compresión horizontal para la placa homogénea sin el agujero, la placa homogénea con agujero, y la placa con el agujero camuflado utilizando diferentes dispositivos; los desplazamientos están en milímetros.

Capítulo 5

Diseño computacional de metamateriales térmicos en régimen transitorio

5.1. Metamateriales térmicos

Considerando ahora el régimen transitorio en el diseño de metamateriales térmicos, varios trabajos bajo el enfoque clásico de transformación de coordenadas fueron realizados, como el ya citado de [Guenneau et al. \(2012\)](#) en la Sección 2.1.1, y los trabajos de [Narayana et al. \(2013\)](#) y [Schittny et al. \(2013\)](#). [Narayana et al. \(2013\)](#) fabrican un metadispositivo para bloqueo térmico sujeto a un proceso de conducción del calor transitorio, cuyo rendimiento se cuantifica en términos de la disminución de la tasa de calentamiento de la zona protegida por el dispositivo. El mismo se construye intentando emular la distribución de conductividad térmica anisótropa e inhomogénea que determina el trabajo de [Guenneau et al. \(2012\)](#) utilizando transformación de coordenadas, mientras que la distribución de la capacidad calorífica se determina empíricamente. Por otro lado, [Schittny et al. \(2013\)](#) realizan un metadispositivo camuflador térmico donde emulan esa anisotropía en la conductividad térmica pero consideran una capacidad calorífica efectiva inhomogénea constante en todo el dispositivo. Es decir, en ambos trabajos no se considera la variación espacial de la capacidad calorífica dada por la Ecuación 2.15 (en caso de camuflaje) como consecuencia de la transformación de coordenadas. Esto último se debe nuevamente a que el enfoque basado en transformación solamente determina la distribución de propiedades efectivas (requeridas para lograr la tarea de manipulación de flujo térmico), y no dice nada de cómo obtener esas propiedades, más aun en casos como los mencionados, en donde es necesario cumplir punto a punto varias propiedades efectivas simultáneamente.

5.1.1. Conducción del calor transitoria en un cuerpo heterogéneo

Se considera nuevamente un dominio en dos dimensiones representado por Ω en la Figura 5.1, hecho de un material heterogéneo, con frontera $\partial\Omega$ dividida en dos partes no superpuestas: $\partial\Omega_q$ (en donde el flujo q_{pared} está prescrito) y $\partial\Omega_T$ (en donde la temperatura T_{pared} está prescrita). A diferencia de la Sección 3.1.1, donde se considera solamente régimen estacionario, la conducción de calor en Ω , teniendo en cuenta el período transitorio y que el flujo de calor obedece la Ley de Fourier, está gobernada por la ecuación

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \text{div}(\mathbf{k} \text{ grad } T) + s \quad \text{en } \Omega, \quad (5.1)$$

con condiciones de borde

$$T = T_{\text{pared}} \quad \text{en } \partial\Omega_T, \quad (5.2)$$

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{n} = q_{\text{pared}} \quad \text{en } \partial\Omega_q, \quad (5.3)$$

y condiciones iniciales

$$T = T_0 \quad \text{para } t = 0, \quad (5.4)$$

donde \mathbf{k} es el tensor de segundo orden de la conductividad térmica efectiva, \mathbf{q} es el campo vectorial del flujo de calor, s es la fuente interna de calor, T es la temperatura, \mathbf{n} es el vector unitario normal a $\partial\Omega$, y ρc es la capacidad calorífica efectiva.

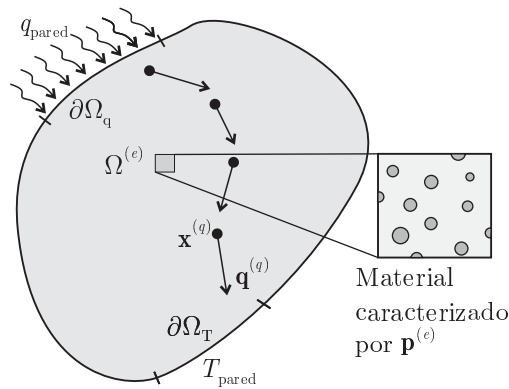


Figura 5.1: Problema de manipulación de flujo de calor en el dominio Ω , donde las propiedades efectivas en cada sub-dominio $\Omega^{(e)}$ dependen de un grupo de parámetros $\mathbf{p}^{(e)}$.

Usando nuevamente MEF, el campo de temperatura en Ω se aproxima como:

$$T(\mathbf{x}, t) = N_j(\mathbf{x})T_j(t) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(t) \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad (5.5)$$

donde N_j es la función de forma asociada al nodo j de la malla de elementos finitos que representa Ω , y T_j es la temperatura de ese nodo (incógnita). En la formulación estándar (Galerkin) de MEF, el vector de temperaturas nodales \mathbf{T} es la solución del sistema algebraico de ecuaciones

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{F}, \quad (5.6)$$

donde \mathbf{C} , \mathbf{K} y \mathbf{F} son las matrices de capacitancia y conductividad global, y el vector de flujos nodales respectivamente (Ecuaciones (2.18), (2.19) y (3.7)), y $\dot{\mathbf{T}}$ es la derivada temporal de las temperaturas nodales.

El problema transitorio (5.6) se integra en el tiempo utilizando nuevamente un esquema incondicionalmente estable de diferencias finitas hacia atrás (Nithiarasu et al., 2016), lo que da origen al siguiente sistema algebraico de ecuaciones en el instante de tiempo $t + \Delta t$:

$$\mathbf{C} \frac{\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t}{\Delta t} + \mathbf{K}\mathbf{T}_{t+\Delta t} = \mathbf{F}, \quad (5.7)$$

el cual debe resolverse para determinar la temperatura $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$ en ese instante una vez que la temperatura anterior \mathbf{T}_t es conocida.

Como en la Sección 3.1.1, al ser Ω un cuerpo heterogéneo, el material varía elemento a elemento en la malla de E elementos finitos $\Omega = \Omega^{(1)} \cup \Omega^{(2)} \cup \dots \cup \Omega^{(E)}$. En el elemento finito $\Omega^{(e)}$, las propiedades materiales o efectivas son funciones de un número finito de parámetros agrupados en el vector $\mathbf{p}^{(e)} = [p_1^{(e)}, p_2^{(e)}, \dots, p_M^{(e)}]$. Así, la conductividad y capacitancia efectivas en el elemento $\Omega^{(e)}$ son

$$\mathbf{k}^{(e)} = \mathbf{k}(\mathbf{p}^{(e)}) \quad (5.8)$$

$$\rho c^{(e)} = \rho c(\mathbf{p}^{(e)}). \quad (5.9)$$

Además, de la contribución de todos los elementos de la malla, las matrices de conductividad y capacitancia globales \mathbf{K} y \mathbf{C} respectivamente son

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}(\mathbf{P}) \quad (5.10)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{P}) \quad (5.11)$$

con

$$\mathbf{P} = [\mathbf{p}^{(1)} \ \mathbf{p}^{(2)} \ \dots \ \mathbf{p}^{(E)}]. \quad (5.12)$$

De esta manera, de la Ecuación de balance (5.7) surge que la temperatura nodal en cada instante de tiempo $t > 0$ es una función de \mathbf{P} , es decir, $\mathbf{T} = \mathbf{T}(\mathbf{P}, t)$.

5.1.2. Manipulación de flujo térmico como solución de un problema de optimización

Si se asume nuevamente que el material obedece la Ley de Fourier, el flujo de calor en un punto $\mathbf{x}^{(q)}$ dentro del elemento finito $\Omega^{(q)}$ es

$$\mathbf{q}^{(q)} = -\mathbf{k}(\mathbf{p}^{(q)})\mathbf{B}(\mathbf{x}^{(q)})\mathbf{T}(\mathbf{P}, t) \equiv \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}, t). \quad (5.13)$$

Manipular el flujo de calor dentro de Ω significa forzar que el mismo tome valores prescritos $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}$ en una serie de puntos de control $\mathbf{x}^{(q)} \in \Omega$, con $\mathbf{x}^{(q)}$ localizado dentro del elemento finito $\Omega^{(q)}$ y $q = 1, 2, \dots, Q$, ver Figura 5.1. Para cumplir esta tarea, se debe encontrar \mathbf{P} tal que

$$\mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}, t) = \bar{\mathbf{q}}^{(q)}, \quad \text{para } q = 1, 2, \dots, Q. \quad (5.14)$$

La búsqueda de \mathbf{P} está restringida a un espacio de diseño admisible \mathcal{D} . En general, no será posible cumplir con la tarea dada utilizando $\mathbf{P} \in \mathcal{D}$, pero puede lograrse con un error que puede definirse como

$$f(\mathbf{P}) = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} g(\mathbf{P}, t) dt, \quad (5.15)$$

donde g es la raíz del error cuadrático medio en el cumplimiento de la tarea en todos los puntos de control en el instante t , dada por

$$g(\mathbf{P}, t) = \left[\frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q \left\| \mathbf{q}^{(q)}(\mathbf{P}, t) - \bar{\mathbf{q}}^{(q)}(t) \right\|^2 \right]^{1/2}. \quad (5.16)$$

Finalmente, con el objetivo de cumplir la tarea dada de manipulación de flujo con el mínimo error posible, se resuelve el siguiente problema de optimización no lineal con restricciones:

$$\min_{\mathbf{P} \in \mathcal{D}} f_{\text{obj}}(\mathbf{P}), \quad (5.17)$$

donde la función objetivo f_{obj} define el error en el cumplimiento de la tarea, y el conjunto de microparámetros P_i que definen la distribución de microestructura en el dominio Ω juegan el rol de variables de diseño del problema de optimización. Si el espacio de diseño factible \mathcal{D} es lo suficientemente rico, se puede obtener un muy buen diseño. Caso contrario, se lo intentará hacer

de la mejor manera posible, es decir, con un mínimo error.

5.1.3. Definición de metamaterial para conducción anisótropa del calor

Nuevamente siguiendo a [Narayana y Sato \(2012\)](#) como en la Sección 3.1.3, la conductividad efectiva anisótropa puede lograrse con un material compuesto o laminado formado por dos Materiales A y B, de marcada diferencia de conductividades térmicas. De esta forma, la conductividad efectiva referida a los ejes fijos Cartesianos $x - y$ en un punto $\mathbf{x}^{(e)}$ de un elemento finito unitario puede ser calculada utilizando la Ecuación (3.15), donde el ángulo $\theta^{(e)}$ para determinar la matriz de rotación es aquel entre el plano de las láminas y el eje x , como se observa en la Figura 5.2. La Ecuación (3.15) define explícitamente la conductividad efectiva en un punto como función de la microestructura en ese punto.

Luego, para un problema transitorio, es también necesario definir la capacidad calorífica efectiva en función de esa microestructura. Siguiendo los trabajos ([Guenneau et al., 2012](#); [Liu et al., 2017](#); [Kadic et al., 2013](#); [Ma et al., 2013](#)), la capacidad calorífica efectiva en el elemento finito $\Omega^{(e)}$ se define como una regla de mezcla lineal

$$\rho c(d_A^{(e)}) = d_A^{(e)} \rho c_A + (1 - d_A^{(e)}) \rho c_B, \quad (5.18)$$

donde las capacidades caloríficas ρc_A y ρc_B corresponden a los Materiales A y B respectivamente, y $d_A^{(e)}$ es el espesor de lámina del Material A en $\Omega^{(e)}$.

5.2. Metadispositivos para manipulación de flujo de calor

Hasta ahora se ha aplicado la metodología basada en optimización al diseño de metadispositivos concebidos para realizar tareas de manipulación térmica pero solo en régimen estacionario. Adaptando el análisis de sensibilidad bajo el método adjunto en problemas transitorios, se diseñan metadispositivos cuyas tareas a realizar están prescritas a lo largo de un intervalo de tiempo durante ese régimen transitorio.

5.2.1. Bloqueo térmico

Aplicando el presente enfoque basado en optimización se diseña un dispositivo para bloquear el flujo de calor en la región que encierra el mismo. Este metadispositivo se compara con el diseñado por [Narayana et al. \(2013\)](#), cuya distribución de conductividad térmica intenta emular lo que deriva del análisis por transformación de coordenadas, y cuya capacidad calorífica se basa en un análisis intuitivo propuesto por los autores. Para poder hacer esta comparación, se adopta

tanto la geometría del dominio, como las propiedades de materiales y condiciones de borde del problema de Narayana et al. (2013).

El dominio de análisis $\Omega = \Omega_{\text{fijext}} \cup \Omega_{\text{disp}} \cup \Omega_{\text{fijint}}$ y las condiciones de borde se detallan en la Figura 5.2. El mismo se considera en dos dimensiones, y aprovechando la simetría del problema con respecto al eje x , se malla solamente la mitad superior utilizando elementos finitos bilineales cuadrangulares.

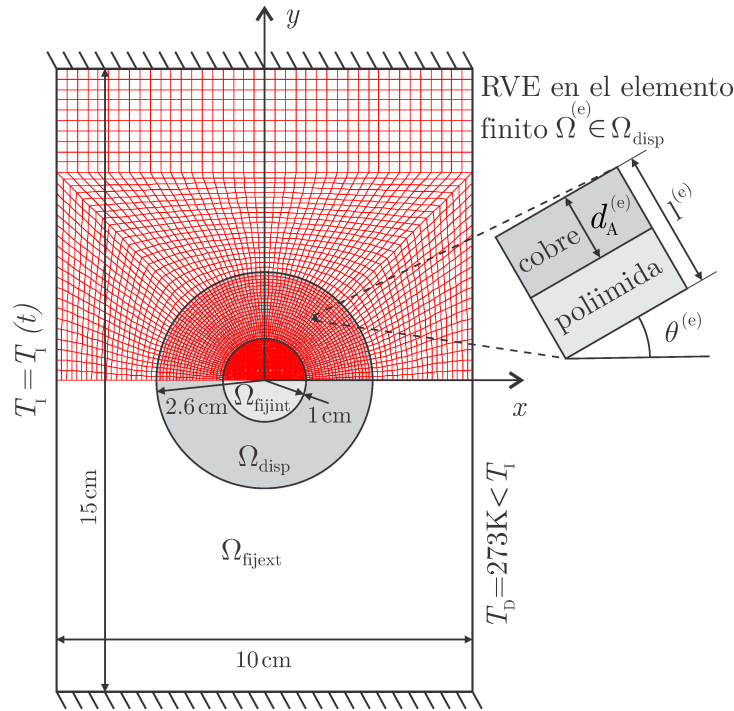


Figura 5.2: Dominio de análisis Ω para el diseño de un bloqueador térmico, y condiciones de borde del problema. A la derecha se detalla el Elemento de volumen representativo (RVE) correspondiente al elemento $\Omega^{(e)}$.

Todo el dominio se asume inicialmente a la temperatura $T_0 = 273 \text{ K}$, es decir, para el tiempo $t = 0$. Para $t > 0$, las paredes inferior y superior se encuentran aisladas térmicamente, la pared de la derecha tiene una temperatura impuesta $T_D = 273 \text{ K}$, mientras que la izquierda posee $T_I = 313 \text{ K}$ hasta que se alcanza el estado estacionario, que se asume cuando el tiempo es suficientemente extenso ($t = 30000 \text{ s}$ para el presente ejemplo). Luego de alcanzado este estado, esa temperatura se incrementa hasta $T_I = 323 \text{ K}$. Todo el análisis transitorio se analiza hasta un tiempo $t_f = 60000 \text{ s}$, cuando un nuevo estado estacionario es alcanzado nuevamente.

El material base para Ω_{fijint} y Ω_{fijext} es un encapsulante conductor térmico a base de silicona denominado Sylgard Q3-3600, con una conductividad térmica isotrópica $k_{\text{base}} = 0.77 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ y capacidad calorífica $\rho c_{\text{base}} = 3.099 \text{ MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$. Para el metadispositivo, es decir Ω_{disp} , se utiliza un compuesto o laminado formado por láminas alternadas de cobre (Material A) y poliimida (Material B), los cuales se consideran isotrópicos, con conductividades térmicas $k_A = 400 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$ y $k_B = 0.17 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$, y capacidades caloríficas $\rho c_A = 3.3495 \text{ MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$ y $\rho c_B = 1.526 \text{ MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$.

Problema de optimización

Diseñar el bloqueador térmico implica resolver el problema de optimización dado por la Ecuación (5.17), cuya función objetivo es (5.15). La tarea de bloqueo se prescribe definiendo $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}(t) = \mathbf{0}$ en cada centro de los elementos en Ω_{fijint} . Notar que para este problema, el vector \mathbf{P} contiene como variables solo los vectores $\mathbf{p}^{(e)}$ que caracterizan la microestructura en los elementos de Ω_{disp} , con $P_{2e-1} = p_1^{(e)} = d_A^{(e)}$ y $P_{2e} = p_2^{(e)} = \theta^{(e)}/\pi$. De esta forma, el presente problema de optimización esta sujeto a las siguientes restricciones de caja $0 \leq P_i \leq 1$. Como punto inicial se toma $P_i = 0.5$.

Nuevamente, el problema de optimización no lineal con restricciones es resuelto utilizando el algoritmo de punto interior IPOPT desarrollado por Wächter y Biegler (2006). Para evitar la aparición de checkboards, se utiliza también la técnica de filtrado de densidad (Bruns y Tortorelli, 2001).

Análisis de sensibilidad

Para resolver eficientemente el problema de optimización no lineal (5.17) es crucial el cálculo analítico de la sensibilidad de la función objetivo f_{obj} con respecto a cambios en las variables de diseño P_i ($\partial f_{\text{obj}}/\partial P_i$). Se determina utilizando el método adjunto para una mayor eficiencia computacional (Tortorelli y Michaleris, 1994). Así, la función objetivo f_{obj} se reescribe como

$$f_{\text{obj}}(\mathbf{P}) = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} g(\mathbf{P}, t) dt - \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{F}) dt, \quad (5.19)$$

siendo nulo el término adicional debido a la Ecuación de balance (5.6), y $\boldsymbol{\lambda}$ es un vector real arbitrario el cual se debe determinar.

Utilizando integración por partes, f_{obj} se puede expresar como

$$f_{\text{obj}}(\mathbf{P}) = \frac{1}{t_f} \left[\int_0^{t_f} g(\mathbf{P}, t) dt - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{C}\mathbf{T} \Big|_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \mathbf{C}\mathbf{T} dt - \int_0^{t_f} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{F}) dt \right] \quad (5.20)$$

cuya derivada con respecto a la componente i -th de \mathbf{P} es

$$\begin{aligned} \frac{df_{\text{obj}}}{dP_i} = \frac{1}{t_f} \left[\int_0^{t_f} \left(\frac{\partial g}{\partial P_i} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} \cdot \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \right) dt - \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \mathbf{T} \Big|_0^{t_f} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{C} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \Big|_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \mathbf{T} dt \right. \\ \left. + \int_0^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \mathbf{C} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} dt - \int_0^{t_f} \boldsymbol{\lambda} \cdot \left(\frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T} + \mathbf{K} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \right) dt \right]. \quad (5.21) \end{aligned}$$

Tomando $d\mathbf{T}/dP_i = \mathbf{0}$ para $t = 0$, y $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$ para $t = t_f$ según Chen y Tong (2004, 2005b), la

ecuación anterior se reduce a

$$\frac{df_{\text{obj}}}{dP_i} = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \left(\mathbf{C}\dot{\boldsymbol{\lambda}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\lambda} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} \right) \cdot \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} dt + \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \left[\frac{\partial g}{\partial P_i} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \left(\frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \dot{\mathbf{T}} + \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T} \right) \right] dt \quad (5.22)$$

De esta forma, para evitar el gran costo computacional de calcular $d\mathbf{T}/dP_i$, se determina el vector adjunto $\boldsymbol{\lambda}$ haciendo que:

$$\mathbf{C}\dot{\boldsymbol{\lambda}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\lambda} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} = \mathbf{0}. \quad (5.23)$$

Este problema transitorio se integra en el tiempo al igual que (5.6), en donde se utiliza un esquema incondicionalmente estable de diferencias finitas hacia atrás (Nithiarasu et al., 2016). Una vez conocido $\boldsymbol{\lambda}_{t+\Delta t}$ en $t + \Delta t$ (empezando desde $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$ en el instante final $t = t_f$), se determina $\boldsymbol{\lambda}_t$ con la siguiente ecuación

$$\mathbf{C} \frac{\boldsymbol{\lambda}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{\lambda}_t}{\Delta t} - \mathbf{K}\boldsymbol{\lambda}_t + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} \Big|_t = \mathbf{0}. \quad (5.24)$$

Utilizando el $\boldsymbol{\lambda}$ ya calculado, la Ecuación (5.22) se reduce a

$$\frac{df_{\text{obj}}}{dP_i} = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \left[\frac{\partial g}{\partial P_i} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \left(\frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \dot{\mathbf{T}} + \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T} \right) \right] dt. \quad (5.25)$$

Finalmente, la sensibilidad de la función objetivo se aproxima utilizando la regla del trapecio para integración numérica:

$$\begin{aligned} \frac{df_{\text{obj}}}{dP_i} \approx \frac{\Delta t}{2t_f} \sum_{j=1}^n \left[\frac{\partial g_{t_j}}{\partial P_i} + \frac{\partial g_{t_{j-1}}}{\partial P_i} - (\boldsymbol{\lambda}_{t_j} + \boldsymbol{\lambda}_{t_{j-1}}) \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \frac{\mathbf{T}_{t_j} - \mathbf{T}_{t_{j-1}}}{\Delta t} \right. \\ \left. - \boldsymbol{\lambda}_{t_j} \cdot \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T}_{t_j} - \boldsymbol{\lambda}_{t_{j-1}} \cdot \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T}_{t_{j-1}} \right]. \quad (5.26) \end{aligned}$$

Resultados

La solución filtrada del problema de optimización (5.17), es decir, el espesor relativo de las láminas de cobre (d_A) y el ángulo de orientación del laminado ($|\theta|$), puede apreciarse en la Figura 5.3. Para esta distribución de microparámetros, la conductividad térmica (componentes k_{ij}) y la capacidad calorífica efectivas resultantes pueden apreciarse en la Figura 5.4. El presente metadispositivo cumple la tarea de bloqueo térmico en Ω_{fijnt} y para el intervalo de tiempo $(0, t_f)$ con un error $f_{\text{obj}} = 3.13 \text{ Wm}^{-2} = 9.15 \times 10^{-3} f_{\text{obj}0}$, siendo $f_{\text{obj}0}$ el error sin la presencia del metadispositivo, es decir, solamente la placa formada por el material base.

Es interesante notar que el dispositivo no es simétrico con respecto al eje y . Esto puede expli-

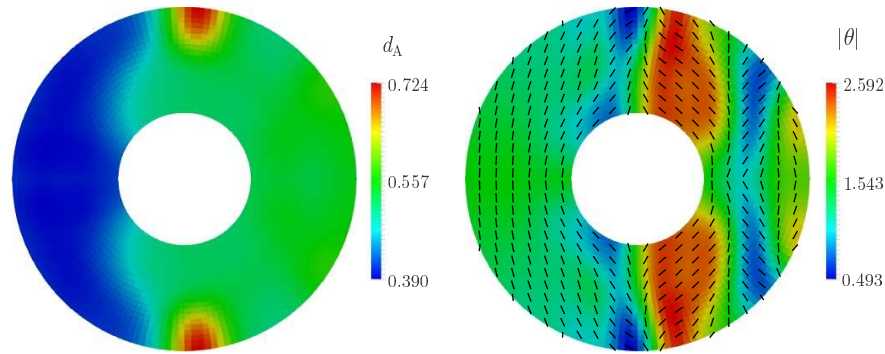


Figura 5.3: Distribución óptima de microparámetros en el metadispositivo (Ω_{disp}). Espesor relativo de las láminas de cobre (d_A), y orientación del laminado ($|\theta|$).

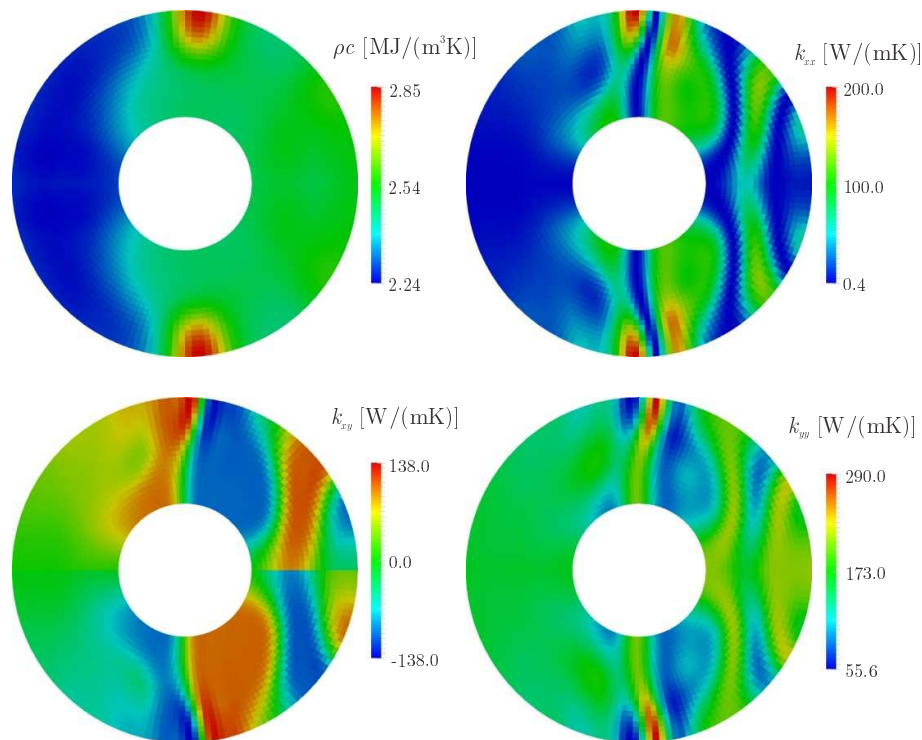


Figura 5.4: Propiedades óptimas en el metadispositivo (Ω_{disp}). Capacidad calorífica efectiva ρc , y componentes k_{ij} de la conductividad térmica efectiva con respecto al marco Cartesiano xy .

carse por el hecho de que los gradientes térmicos aguas arriba de Ω_{fijint} son mayores que aquellos aguas abajo durante el proceso transitorio de conducción térmica. De esta forma, aguas arriba las láminas de cobre son finas y están orientadas verticalmente, haciendo que ρc sea bajo y k_{xx} prácticamente despreciable. Esta distribución particular de las propiedades térmicas hace que se dificulte el flujo de calor hacia Ω_{fijint} , a pesar de los altos gradientes térmicos en esa región. Acercándose a Ω_{fijint} , los laminados son progresivamente reorientados y se van haciendo tangentes a la frontera de Ω_{fijint} , incrementando k_{xy} y forzando a que el calor pase por fuera de Ω_{fijint} . Aguas abajo de esta región, las láminas de cobre son más gruesas, lo que lleva a un incremento en la capacidad calorífica y conductividad térmica. Además, las láminas son reorientadas para así conducir el calor hacia afuera del dispositivo Ω_{disp} .

La influencia del dispositivo sobre el campo de temperatura en el dominio Ω puede verse en la Figura 5.5. También se pueden apreciar las líneas de flujo de calor, las cuales son bastante diferentes que en el caso de conducción térmica unidimensional (líneas paralelas) en un dominio homogéneo sin el dispositivo. La forma en que el metadispositivo guía el flujo de calor hacia afuera de Ω_{fijint} puede verse en estas líneas. Por último, y muy importante, la temperatura en Ω_{fijint} se reduce significativamente durante todo el proceso de conducción térmica en comparación con el caso donde solo se tiene la placa homogénea. Esto último puede evidenciarse en la Figura 5.6 en donde se grafica la evolución de la temperatura sobre el eje x de la placa durante todo el proceso transitorio.

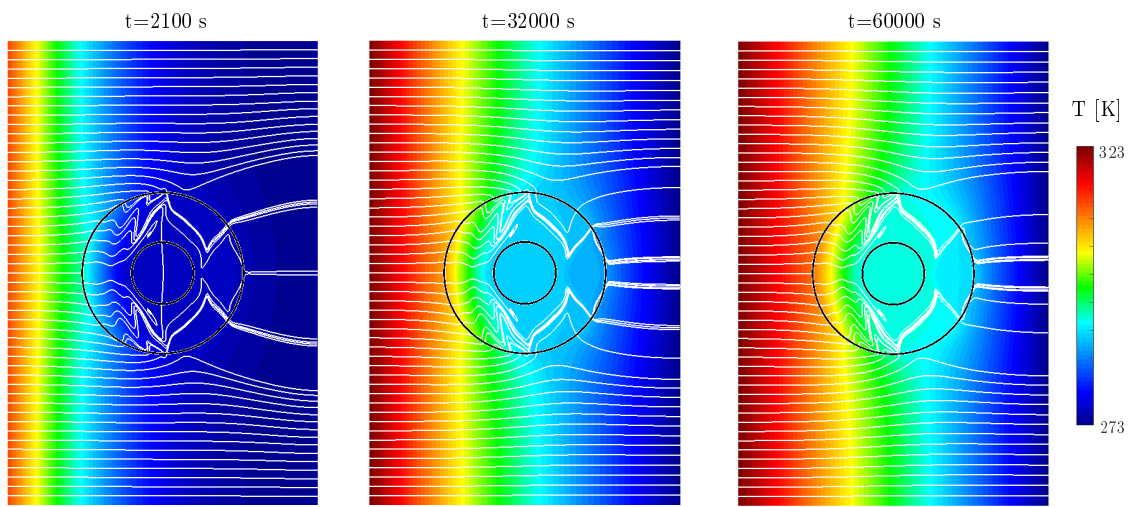


Figura 5.5: Campo de temperatura y líneas de flujo de calor en el dominio Ω para diferentes instantes de tiempo.

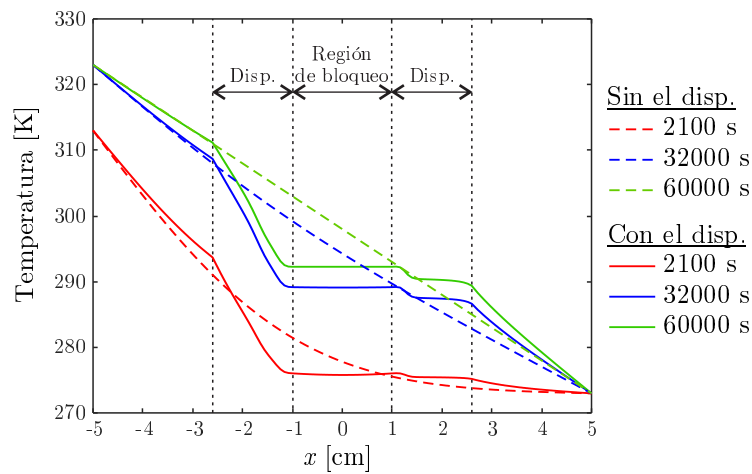


Figura 5.6: Temperatura a lo largo del eje x (eje de simetría) para distintos instantes de tiempo para el dominio Ω con y sin el metadispositivo.

5.2.2. Sobre la importancia del diseño de metadispositivos para régimen transitorio

En esta sección se compara el metadispositivo diseñado teniendo en cuenta el régimen transitorio (5.2.1), con otro diseñado solamente para bloquear de calor una vez que se alcanza el estado estacionario (similar al de la Sección 3.2.2).

La distribución óptima de material en el metadispositivo concebido para bloqueo en régimen estacionario puede observarse en la Figura 5.7. El mismo cumple la tarea de bloqueo con un error $f_{obj} = 5.31 \text{ Wm}^{-2}$, el cual es 1.70 veces el error obtenido con el metadispositivo diseñado específicamente para régimen transitorio. Notar también que en este caso, el dispositivo es simétrico con respecto al eje y , como lo es también el dispositivo diseñado por Narayana et al. (2013). Dada esta simetría, el desempeño de estos dispositivos se ve seriamente afectado por los altos gradientes aguas arriba de Ω_{disp} durante las primeras etapas del proceso transitorio, lo que podría explicar el porqué de que estos dispositivos tengan un bajo rendimiento.

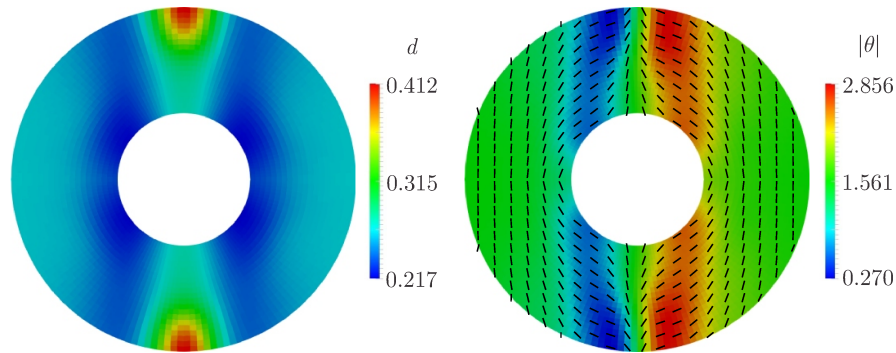


Figura 5.7: Distribución óptima de microparámetros en el metadispositivo (Ω_{disp}) diseñado para régimen estacionario. Espesor relativo de las láminas de cobre (d_A), y orientación del laminado ($|\theta|$).

El error instantáneo g (Ecuación (5.16)) en el cumplimiento de la tarea de bloqueo térmico se grafica en la Figura 5.8, la cual exhibe el rendimiento superior que tiene el metadispositivo diseñado específicamente para trabajar en régimen transitorio a lo largo de todo el proceso, particularmente al inicio del calentamiento.

Narayana et al. (2013) no reportan información suficiente como para hacer la comparación anterior. Ellos miden el desempeño del dispositivo en términos del incremento de la temperatura ΔT en el centro de Ω_{fijint} desde el comienzo de la segunda etapa de calentamiento, es decir, desde $t = 30000$ s. Esto puede verse en la Figura 5.9, junto con las curvas que corresponden al dominio con y sin metadispositivos. Notar que al comienzo, la tasa de calentamiento utilizando el metadispositivo diseñado considerando el régimen transitorio es levemente mayor que la del dispositivo de Narayana et al. (2013), pero luego disminuye considerablemente. Luego, cuando el estado estacionario es alcanzado, el aumento de temperatura tanto para el dispositivo de Narayana et al. (2013) como para el dominio homogéneo es el mismo ($\Delta T = 5$ K). En cambio, para el

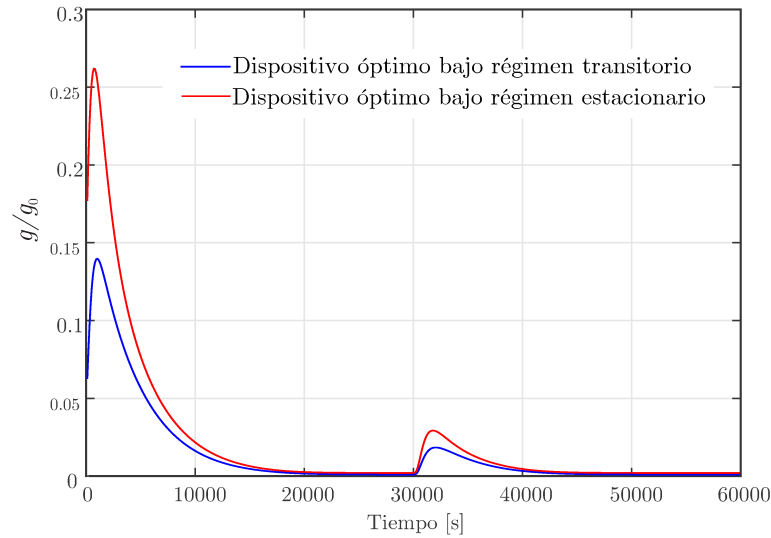


Figura 5.8: Evolución del error instantáneo g en el cumplimiento de la tarea de bloqueo térmico para los metadispositivos diseñados, en relación con el error instantáneo g_0 para el caso del dominio homogéneo.

metadispositivo diseñado, ese aumento es de $\Delta T = 3.68$ K. También en esa gráfica se plotea el calentamiento para el metadispositivo considerando solo el estado estacionario. El aumento medido es de $\Delta T = 5.12$ K, levemente superior que el caso homogéneo. Por último, hay que tener en cuenta que estos dispositivos no fueron diseñados considerando como función objetivo este aumento de temperatura ΔT . Sin embargo, cambiar de función objetivo es fácilmente posible utilizando la metodología de optimización propuesta.

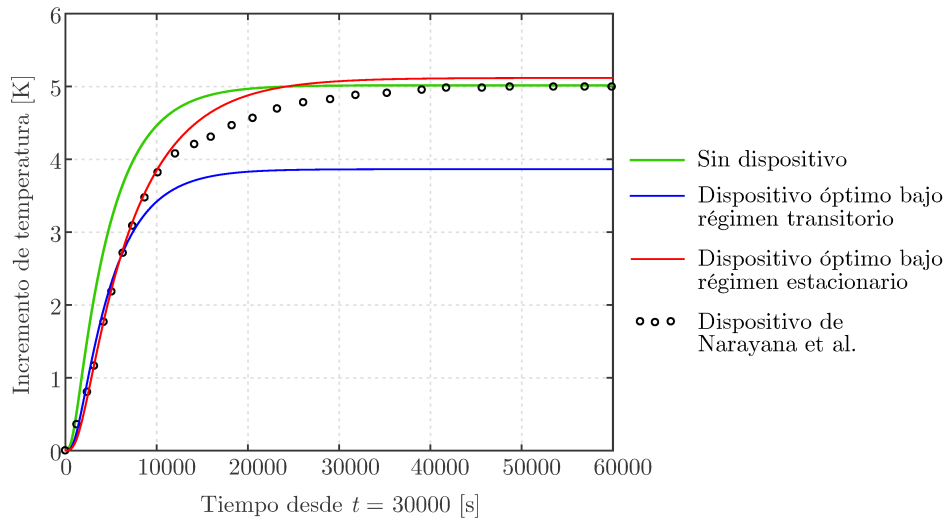


Figura 5.9: Evolución de la temperatura en el centro de Ω_{fijint} desde la segunda etapa de calentamiento ($t = 30000$ s).

5.2.3. Camuflaje y bloqueo térmico

La tarea de camuflaje y bloqueo térmico se logra simplemente imponiendo $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}(t) = \mathbf{q}_{\text{hom}}^{(q)}(t)$ en cada centro de los elementos en Ω_{fijext} , donde \mathbf{q}_{hom} es el flujo de calor que existe en Ω sin

el dispositivo, e imponiendo también $\bar{\mathbf{q}}^{(q)}(t) = \mathbf{0}$ en cada elemento de Ω_{fijint} , como se hizo en la Sección 5.2.1. La distribución óptima de material para el presente metadispositivo puede observarse en la Figura 5.10, el cual logra realizar la tarea combinada de camuflaje y bloqueo con un error de $f_{\text{obj}} = 5.31 \text{ Wm}^{-2}$. Si se separan ambas tareas, el bloqueo se logra con $f_{\text{obj}} = 4.46 \text{ Wm}^{-2} = 13.04 \times 10^{-3} f_{\text{obj}0}$, valor que es 1.425 veces el error obtenido para el dispositivo diseñado solamente para bloquear el flujo térmico, pero 0.84 veces el valor del dispositivo bloqueador diseñado para régimen estacionario (Sección 5.2.2). En otras palabras, podría decirse que el presente dispositivo no funciona tan bien como aquel diseñado específicamente para bloquear el calor en régimen transitorio, pero si lo hace comparado con el diseñado para trabajar en régimen estacionario.

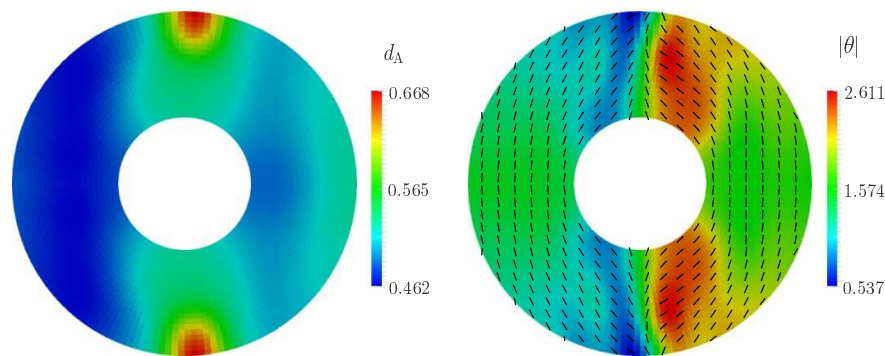


Figura 5.10: Distribución óptima de microparámetros en el metadispositivo (Ω_{disp}) para camuflaje y bloqueo térmico. Espesor relativo de las láminas de cobre (d_A), y orientación del laminado ($|\theta|$).

La influencia del metadispositivo sobre el campo de temperatura en Ω puede verse en la Figura 5.11. Las líneas de flujo térmico fuera del dispositivo (en Ω_{fijext}) se mantienen prácticamente inalteradas, lo que demuestra el buen cumplimiento de la tarea. A su vez, los gradientes térmicos en Ω_{fijint} son débiles, lo que también demuestra el buen comportamiento del dispositivo para bloquear el flujo hacia el interior de esa zona. Sin embargo, no son tan débiles como los del dispositivo que fue diseñado específicamente para esa tarea, particularmente al inicio del calentamiento (más líneas de flujo térmico ingresan a Ω_{fijint}). Esto demuestra nuevamente que un dispositivo diseñado para cumplir múltiples tareas tiene un rendimiento menor que aquel diseñado para satisfacer particularmente una de esas tareas. Esto manifiesta de nuevo una ventaja de la metodología basada en optimización con respecto a la clásica de transformación de coordenadas, donde el camuflaje es un efecto colateral de esa metodología.

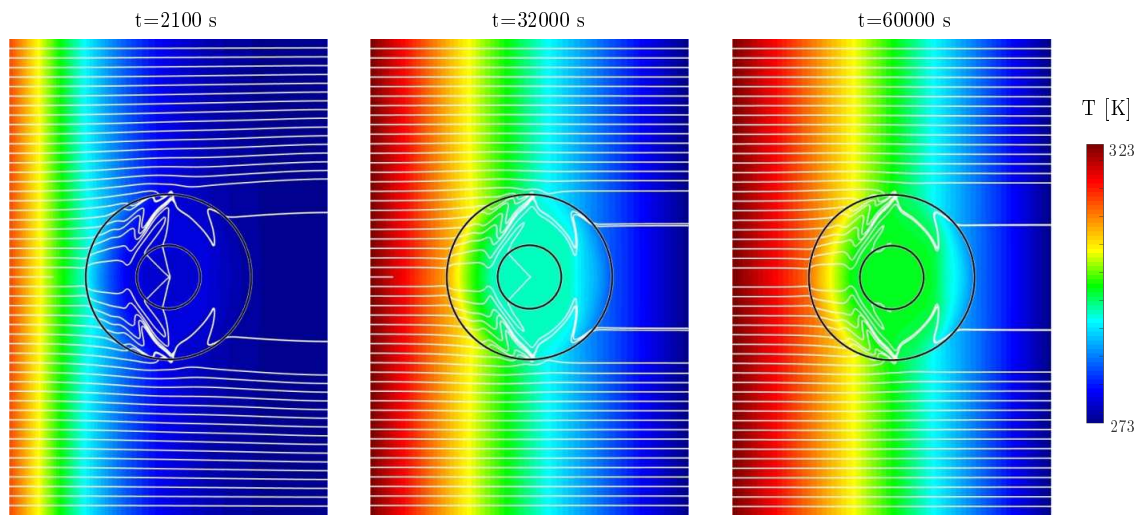


Figura 5.11: Campo de temperatura y líneas de flujo de calor en el dominio Ω para diferentes instantes de tiempo para el metadispositivo camuflador y bloqueador térmico.

Capítulo 6

Conclusiones

En esta Tesis se presenta una novedosa metodología de diseño computacional de materiales avanzados interviniendo sobre su microestructura a fin de alcanzar respuestas macroscópicas controladas a solicitaciones de origen térmico y/o mecánico. La misma consiste en resolver un problema de optimización en donde la función objetivo a minimizar es el error en el cumplimiento de esas repuestas macoscópicas, y las variables de diseño definen la distribución de microestructura del material. Se demuestra exitosamente su potencial aplicándola al diseño de metamateriales térmicos bajo régimen estacionario o transitorio, y metamateriales mecánicos en régimen estático.

Se diseñan así metamateriales térmicos para controlar el flujo de calor difusivo en formas imposibles de lograr utilizando materiales ordinarios. Se minimiza una función que mide el error en el cumplimiento de una tarea determinada de manipulación de flujo térmico, y las variables de diseño del problema de minimización definen la distribución de microestructura en el dispositivo manipulador. El aporte de este nuevo enfoque de diseño de metamateriales es la posibilidad de resolver tareas de manipulación térmica arbitrarias utilizando solamente una misma función objetivo (a diferencia de otros enfoques por optimización), y se pueden representar concentración, inversión y camuflaje térmico como casos particulares de aplicación. Esto es una ventaja en comparación con las metodologías de transformación de coordenadas y mapeo conforme, clásicas del diseño de metamateriales térmicos, en donde se debe encontrar el mapeo adecuado en función de la tarea de manipulación térmica que se quiera lograr. Lo interesante además es la posibilidad de combinar diferentes tareas, permitiendo el diseño de dispositivos con múltiples capacidades de manipulación térmica. Esto último habilita por ejemplo, el diseño de dispositivos concentradores o inversores con el adicional de lograr camuflaje térmico como una tarea deseada, y no como un efecto colateral, algo que no sucede con transformación de coordenadas, en donde la aparición de camuflaje es consecuencia de esa formulación.

La potencialidad del diseño computacional de materiales se comprobó diseñando diferentes

dispositivos manipuladores, como ser: dispositivo de alta eficiencia para concentración de energía, que tiene además como característica adicional la no distorsión del flujo térmico del entorno, es decir, permite camuflaje térmico; dispositivo para camuflaje y bloqueo térmico; e inversor de flujo de calor, con y sin camuflaje. Todo estos ejemplo mostraron además la facilidad del método para adaptarse a diferentes tareas de manipulación térmica. Adicionalmente se comprueba la importancia de diseñar un metamaterial considerando régimen transitorio. Los resultados mostraron que un dispositivo para bloquear el flujo térmico en régimen transitorio posee un mayor desempeño que aquel que fue pensado solamente para trabajar una vez alcanzado el estado estacionario.

En busca de lograr dispositivos de fácil fabricación se considera fabricabilidad, la cual permite obtener metadispositivos para manipular el flujo térmico utilizando un número reducido de materiales candidatos, que pueden ser laminados con diferentes orientaciones, o en el caso más simple, materiales homogéneos e isótropos. En base a esto último se demostró que con el simple arreglo de materiales isótropos y homogéneos se pueden obtener dispositivos para manipulación extrema de flujo térmico, como lo es la inversión del flujo de calor, lo que prueba además que la manufactura industrial de estos materiales será posible en el corto plazo. Más aun, con el objetivo de resaltar la fácil fabricación de los dispositivos así diseñados, se fabricó y ensayó un inversor térmico formado por dos materiales homogéneos e isótropos (de contrastada conductividad), obteniendo excelentes resultados de inversión térmica en comparación con dispositivos similares de la literatura. Todo esto refuta la idea o creencia generalizada de que es imperativo utilizar metamateriales anisótropos no homogéneos para la manipulación de campos macroscópicos.

Es importante resaltar que la metodología clásica de diseño de metamateriales térmicos, basada en transformación de coordenadas, solamente determina las propiedades punto a punto que debe cumplir el material para realizar la tarea de manipulación térmica deseada, pero no dice nada de cómo obtener esas propiedades, que en algunos casos llegan a tener valores extremos (por ejemplo, conductividad térmica infinita o nula). Es por ello que surge una ventaja importante de la metodología de diseño computacional propuesta, y es que la misma permite determinar la forma de fabricación de estos materiales, es decir, encontrar la distribución de microestructura que garantiza el cumplimiento de la tarea de manipulación térmica con un mínimo error. Más aun, en procesos de transferencia de calor en régimen transitorio, es necesario emular simultáneamente la capacidad calorífica y la conductividad térmica resultante de la transformación de coordenadas, por lo que en estos casos, la ventaja de la nueva metodología es aun más notoria.

El diseño de metamateriales térmicos ha sembrado un camino novedoso para manipular la energía térmica. Los ejemplos analizados en esta Tesis revelan la potencialidad de estos materiales para controlar el flujo de calor difusivo, tanto en régimen estacionario como transitorio. Los ex-

celentes resultados reportados abren nuevas posibilidades para estos materiales de diseño, los que pueden encontrar aplicaciones en incrementar la eficiencia de dispositivos térmicos en colectores solares, en proteger circuitos electrónicos de sobrecalentamiento, o en el diseño de los análogos térmicos de transistores, rectificadores y diodos electrónicos.

Respecto al diseño de metamateriales mecánicos, debido al escaso conocimiento acerca de la realización de los materiales resultantes de la clásica transformación de coordenadas aplicada a la Elasticidad, la metodología propuesta de diseño computacional permite sortear este inconveniente, nuevamente debido a que la misma proporciona la distribución de microestructura que garantiza el comportamiento deseado del material. Esto se comprueba exitosamente en los ejemplos analizados en donde se diseñaron metamateriales mecánicos fabricables preparados para trabajar en régimen elasto-estático. Los mismos permiten controlar a voluntad el campo de desplazamientos en un dominio arbitrario sujeto a esfuerzos tanto mecánicos, como termo-mecánicos. Se minimiza así una función que mide el error en el cumplimiento de una distribución de desplazamientos determinada (y consecuentemente de deformaciones), y las variables de diseño del problema de minimización definen la distribución de microestructura en el metadispositivo mecánico. El principal aporte de este nuevo enfoque es que permite diseñar metamateriales mecánicos fabricables en general, y no se limita a la aplicación en materiales basados en reticulados, metodología utilizada hasta el momento para lograr la materialización de estos nuevos materiales. La potencialidad del método se demostró diseñando un dispositivo para camuflar un agujero en una placa sujeta tanto a esfuerzos mecánicos, como termo-mecánicos acoplados, logrando excelentes resultados, tanto mejor que los de la literatura existente.

En vista de lograr también metamateriales mecánicos de fácil materialización, se considera nuevamente fabricabilidad para diseñar dispositivos formados por materiales isótropos y homogéneos que macroscópicamente se comportan como metamateriales, y permiten por ejemplo, lograr camuflar un agujero en una placa sujeta a esfuerzos mecánicos utilizando solamente dos materiales homogéneos e isótropos de contrastada rigidez.

Por lo que se conoce hasta ahora, transformación de coordenadas o mapeo conforme ha sido aplicado a problemas puramente mecánicos o térmicos, pero no a problemas termo-mecánicos acoplados. Aún así, si se encontrara una transformación que resultase en la invariancia de las ecuaciones elásticas y térmicas acopladas, todavía resta por determinar cómo lograr o emular simultáneamente las propiedades térmicas y mecánicas resultantes de dicha transformación, y requeridas punto a punto del metamaterial. La presente metodología de diseño computacional resuelve nuevamente tal problema, ya que como se dijo anteriormente, permite determinar directamente la distribución de microestructura que debe cumplir el metamaterial para lograr la tarea

deseada. De esta manera, su contribución al diseño de metamateriales mecánicos continúa siendo de notable importancia.

6.1. Publicaciones en revistas científicas

A continuación se listan las contribuciones científicas derivadas del desarrollo del presente Doctorado. Se separan aquellas publicaciones que derivan directamente del desarrollo de la Tesis, como las que surgieron de otras actividades de investigación durante el Doctorado.

6.1.1. Publicaciones derivadas de la Tesis

- I. Peralta, V. D. Fachinotti y Á. A. Ciarbonetti. Optimization-based design of a heat flux concentrator. *Sci. Rep.* 7, 40591 (2017).
- I. Peralta y V. D. Fachinotti. Optimization-based design of heat flux manipulation devices with emphasis on fabricability. *Sci. Rep.* 7, 6261 (2017).
- V. D. Fachinotti, Á. A. Ciarbonetti, I. Peralta e I. Rintoul. Optimization-based design of easy-to-make devices for heat flux manipulation. *Int. J. Therm. Sci.* 128, 38-48 (2018).
- V. D. Fachinotti, I. Peralta y A. E. Albanesi. Optimization-based design of an elastostatic cloaking device. *Sci. Rep.* 8, 9857 (2018).
- J. C. Álvarez Hostos, V. D. Fachinotti e I. Peralta. Metamaterial for elastostatic cloaking under thermal gradients. *Sci. Rep.* 9, 3614 (2019).
- J. C. Álvarez Hostos, V. D. Fachinotti, I. Peralta y B. A. Tourn. Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* (2019).
- I. Peralta, V. D. Fachinotti y J. C. Álvarez Hostos. A brief review on thermal metamaterials for cloaking and heat flux manipulation. *Advanced Engineering Materials*, 1901034 (2019).

6.1.2. Publicaciones derivadas del Doctorado

- A. E. Albanesi, V. D. Fachinotti, I. Peralta, B. A. Storti y C. Gebhardt. Application of the inverse finite element method to design wind turbine blades. *Compos. Struct.* 161, 160–172 (2016).

- B. A. Storti, J. J. Dorella, N. D. Roman, I. Peralta y A. E. Albanesi. Improving the efficiency of a Savonius wind turbine by designing a set of deflector plates with a metamodel-based optimization approach. *Energy* 186, (2019).

6.2. Publicaciones y presentaciones en congresos durante el Doctorado

Se detallan a continuación las diferentes publicaciones y presentaciones realizadas en congresos durante la realización del Doctorado.

- I. Peralta, Á. A. Ciarbonetti, A. E. Albanesi y V. D. Fachinotti. Diseño de metamateriales para manipulación del flujo de calor como solución de un problema de optimización. Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2016, Córdoba, Argentina. Trabajo completo y presentación oral.
- V. D. Fachinotti, I. Peralta, A. E. Huespe y Á. A. Ciarbonetti. Control of heat flux using computationally designed metamaterials. 5th International Conference on Engineering Optimization, Iguassu Falls, Brazil. 2016. Trabajo completo.
- I. Peralta y V. D. Fachinotti. Diseño de metamateriales térmicos considerando fabricabilidad. Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2017, La Plata, Argentina. Resumen y presentación oral.
- B. A. Storti, I. Peralta, J. J. Dorella, N. D. Román, A. E. Albanesi y L. Garelli. Diseño y optimización mediante CFD y Redes Neuronales de deflectores para una turbina Savonius. Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2017, La Plata, Argentina. Trabajo completo y presentación oral.
- J. C. Álvarez Hostos, I. Peralta y V. D. Fachinotti. Diseño basado en optimización de dispositivos para manipular el flujo de calor considerando propiedades de transporte termo-dependientes. MECOM 2018, Tucumán, Argentina. Resumen.
- J. C. Álvarez Hostos, I. Peralta y V. D. Fachinotti. Camuflaje mecánico frente a cargas térmicas mediante dispositivos diseñados por optimización. MECOM 2018, Tucumán, Argentina. Resumen.
- A. E. Albanesi, I. Peralta, F. Bre, B. A. Storti y V. D. Fachinotti. Metodología de diseño de álabes de turbinas eólicas de material compuesto combinando optimización metaheurística

y topológica. Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2019, Santa Fe, Argentina. Resumen y presentación oral.

- J. C. Álvarez Hostos, V. D. Fachinotti y I. Peralta. Diseño computacional de meta-dispositivos para manipular el flujo de calor considerando efectos transitorios y propiedades termo-dependientes. Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones, ENIEF 2019, Santa Fe, Argentina. Resumen.

6.3. Líneas de investigación a futuro

La versatilidad del enfoque basado en optimización desarrollado en esta Tesis muestra su máxima expresión en los diferentes ejemplos analizados, desde la manipulación a voluntad de flujos de calor, hasta la extensión a problemas con cargas térmicas y mecánicas acopladas, por lo que su aplicación a otros casos de estudio se considera de interés para continuar investigando. Si bien esa versatilidad lo hace indiferente a la dimensionalidad del problema, en la práctica se encuentran limitaciones a causa de la potencia o del tiempo de cálculo. De hecho, se han desarrollado hasta aquí herramientas programadas para correr en ordenadores de escritorio secuenciales, lo que no ha permitido resolver problemas tridimensionales con la densidad de malla suficiente. De esta manera, se pretende a futuro desarrollar herramientas de computación de alta performance para llegar a resolver problemas de 10^7 elementos finitos y variables de diseño, como mínimo. Para ello, se pretende recurrir a métodos y plataformas de código abierto, como Code-Aster (*ASTER*), IPOPT (*Wächter y Biegler, 2006*), pyOpt (*Perez et al., 2012*), por ejemplo. Se contribuirá así también a objetivos generales del lugar de trabajo en donde se realizó el Doctorado, como los encuadrados en el Proyecto de Investigación para Unidades Ejecutoras del CONICET “Plataforma para Simulación en Problemas Tecnológicos e Industriales”, donde se proponen desarrollar nuevos métodos y plataformas de código abierto para la simulación de problemas en investigación, tecnologías innovativas y aplicaciones industriales.

De esta manera, se listan a continuación algunos alcances que no se incluyen en la presente Tesis y que son interesantes para ser considerados en trabajos futuros:

1. Modelado de no linealidades:

- a) grandes deformaciones elásticas;
- b) Elasticidad no lineal;
- c) propiedades térmicas dependientes de la temperatura, incluyendo cambios de fase;

Bibliografía

- Ahrens J., Geveci B., y Law C. Paraview: An end-user tool for large data visualization. *The visualization handbook*, 717, 2005.
- Almgren R.F. An isotropic three-dimensional structure with poisson's ratio = -1. *Journal of Elasticity*, 15:427–430, 1985.
- Arora J.S. y Wang Q. Review of formulations for structural and mechanical system optimization. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 30(4):251–272, 2005. doi:10.1007/s00158-004-0509-6.
- ASTER. Electricité de france. finite element *code_aster*, Analysis of Structures and Thermomechanics for Studies and Research (1989–2017). Open source on www.code-aster.org, ????
- Babae S., Shim J., Weaver J., Chen E., Patel N., y Bertoldi K. 3D soft metamaterials with negative Poisson's ratio. *Adv. Mater.*, 25(36):5044–5049, 2013.
- Bandaru P., Vemuri K., Canbazoglu F., y Kapadia R. Layered thermal metamaterials for the directing and harvesting of conductive heat. *AIP Advances*, 5(053403), 2015.
- Bückmann T., Kadic M., Schittny R., y Wegener M. Mechanical cloak design by direct lattice transformation. *PNAS*, 112:4930–4934, 2015.
- Bückmann T., Thiel M., Kadic M., Schittny R., y Wegener M. An elasto-mechanical unfeelability cloak made of pentamode metamaterials. *Nature Communications*, 5(1), 2014. doi:10.1038/ncomms5130.
- Bendsøe M.P. y Sigmund O. *Topology optimization. Theory, methods, and applications*. Springer-Verlag, 2003.
- Bishop J. Shaped metal deposition apparatus. US Patent Application 20100251961, Rolls-Royce PLC, London UK, 2010.
- Brun M., Guenneau S., y Movchan A.B. Achieving control of in-plane elastic waves. *Applied Physics Letters*, 94(6):061903, 2009. doi:10.1063/1.3068491.
- Bruns T.E. y Tortorelli D.A. Topology optimization of non-linear elastic structures and compliant mechanisms. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 190:3443–3459, 2001.
- Bückmann T., Schittny R., Thiel M., Kadic M., Milton G., y Wegener M. On three-dimensional dilational elastic metamaterials. *New J. Phys.*, 16:033032, 2014.
- Bückmann T., Stenger N., Kadic M., Kaschke J., Frölich A., Kennerknecht T., Thiel M., y Wegener M. Tailored 3D mechanical metamaterials made by dip-in direct-laser-writing optical lithography. *Adv. Mater.*, 24(20):2710–4, 2012.
- Cai W., Chettiar U.K., Kildishev A.V., y Shalaev V.M. Optical cloaking with metamaterials. *Nature Photo-*

- nics*, 1(4):224–227, 2007. doi:10.1038/nphoton.2007.28.
- Chen B. y Tong L. Sensitivity analysis of heat conduction for functionally graded materials. *Materials & Design*, 25(8):663–672, 2004. doi:10.1016/j.matdes.2004.03.007.
- Chen B. y Tong L. Thermomechanically coupled sensitivity analysis and design optimization of functionally graded materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(18-20):1891–1911, 2005a. doi:10.1016/j.cma.2004.07.005.
- Chen B. y Tong L. Thermomechanically coupled sensitivity analysis and design optimization of functionally graded materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(18-20):1891–1911, 2005b. doi:10.1016/j.cma.2004.07.005.
- Chen F. y Lei D. Experimental realization of extreme heat flux concentration with easy-to-make thermal metamaterials. *Sci. Rep.*, 5, 2015.
- Chen H. y Chan C.T. Acoustic cloaking in three dimensions using acoustic metamaterials. *Applied Physics Letters*, 91(18):183518, 2007a. doi:10.1063/1.2803315.
- Chen H. y Chan C.T. Transformation media that rotate electromagnetic fields. *Appl. Phys. Lett.*, 90:241105, 2007b.
- Chen H., Wu B.I., Zhang B., y Kong J.A. Electromagnetic wave interactions with a metamaterial cloak. *Phys. Rev. Lett.*, 99:063903, 2007.
- Chen H. y Zheng B. Broadband polygonal invisibility cloak for visible light. *Scientific Reports*, 2(1), 2012. doi:10.1038/srep00255.
- Chen H., Zheng B., Shen L., Wang H., Zhang X., Zheludev N.I., y Zhang B. Ray-optics cloaking devices for large objects in incoherent natural light. *Nature Communications*, 4(1), 2013a. doi:10.1038/ncomms3652.
- Chen J., Rungsiyakull C., Li W., Chen Y., Swain M., y Li Q. Multiscale design of surface morphological gradient for osseointegration. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 20:387–397, 2013b.
- Chen T., Weng C., y Chen J. Cloak for curvilinearly anisotropic media in conduction. *Appl. Phys. Lett.*, 93, 2008.
- Chen X., Luo Y., Zhang J., Jiang K., Pendry J.B., y Zhang S. Macroscopic invisibility cloaking of visible light. *Nature Communications*, 2(1), 2011. doi:10.1038/ncomms1176.
- Cosserat E. y Cosserat F. *Théorie des corps déformables*. Librairie Scientifique A. Hermann et Fils, Paris, 1909.
- Cummer S.A., Popa B.I., Schurig D., Smith D.R., Pendry J., Rahm M., y Starr A. Scattering theory derivation of a 3D acoustic cloaking shell. *Phys. Rev. Lett.*, 100:024301, 2008.
- Dede E.M. Simulation and optimization of heat flow via anisotropic material thermal conductivity. *Computational Materials Science*, 50(2):510–515, 2010. doi:10.1016/j.commatsci.2010.09.012.
- Dede E.M., Nomura T., y Lee J. Thermal-composite design optimization for heat flux shielding, focusing, and reversal. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 49(1):59–68, 2013a. doi:10.1007/s00158-013-0963-0.
- Dede E.M., Nomura T., y Lee J. Thermal-composite design optimization for heat flux shielding, focusing,

- and reversal. *Struct. Multidisc. Optim.*, 49:59–68, 2014.
- Dede E.M., Nomura T., Schmalenberg P., y Lee J.S. Heat flux cloaking, focusing, and reversal in ultra-thin composites considering conduction-convection effects. *Applied Physics Letters*, 103(6):063501, 2013b. doi:10.1063/1.4816775.
- Ergin T., Stenger N., Brenner P., Pendry J.B., y Wegener M. Three-dimensional invisibility cloak at optical wavelengths. *Science*, 328(5976):337–339, 2010. doi:10.1126/science.1186351.
- Fachinotti V., Corre S.L., Orgéas L., y Huespe A. Computational design of microstructure for structural optimization. En *Procs. of 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics (PANACM2015)*. International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), Buenos Aires, Argentina, 2015a. Resumen en <http://congress.cimne.com/PANACM2015/admin/files/fileabstract/a852.pdf>.
- Fachinotti V., Giusti S., Bre F., y Huespe A. Computational design of microstructure for the optimization of the temperature-dependent macroscopic response. En *Procs. of 1st Pan-American Congress on Computational Mechanics (PANACM2015)*. International Center for Numerical Methods in Engineering (CIMNE), Buenos Aires, Argentina, 2015b. Resumen en <http://congress.cimne.com/PANACM2015/admin/files/fileabstract/a849.pdf>.
- Fachinotti V., Toro S., y Sánchez P. Diseño óptimo de materiales para piezas sujetas a esfuerzos termomecánicos. En C.G. Garino, A. Mirasso, M. Storti, y M. Tornello, editores, *Mecánica Computacional*, volumen XXXII, páginas 425–438. Asociación Argentina de Mecánica Computacional (AMCA), Mendoza, Argentina, 2013.
- Fachinotti V., Toro S., Sánchez P., y Huespe A. Sensitivity of the thermomechanical response of elastic structures to microstructural changes. *Int. J. Solids and Structures*, 69-70:45–59, 2015c.
- Fachinotti V.D., Ciarbonetti A.A., Peralta I., y Rintoul I. Optimization-based design of easy-to-make devices for heat flux manipulation. *Int. J. Therm. Sci.*, 128:38–48, 2018a.
- Fachinotti V.D., Peralta I., y Albanesi A.E. Optimization-based design of an elastostatic cloaking device. *Sci. Reps.*, 8(1), 2018b. doi:10.1038/s41598-018-28069-7.
- Fan C., Gao Y., y Huang J. Shaped graded materials with an apparent negative thermal conductivity. *Appl. Phys. Lett.*, 92:251907, 2008.
- Fletcher R. y Leyffer S. Nonlinear programming without a penalty function. *Mathematical Programming*, 91(2):239–269, 2002. doi:10.1007/s101070100244.
- Gabrielli L.H., Cardenas J., Poitras C.B., y Lipson M. Silicon nanostructure cloak operating at optical frequencies. *Nature Photonics*, 3(8):461–463, 2009. doi:10.1038/nphoton.2009.117.
- Giusti S. y Novotny A. Topological derivative for an anisotropic and heterogeneous heat diffusion problem. *Mech. Res. Commun.*, 46:26–33, 2012.
- Govaert L., Brown B., y Smith P. Temperature dependence of the young's modulus of oriented polyethylene. *Macromolecules*, 25(13):3480–3483, 1992. doi:10.1021/ma00039a027.
- Grbic A. y Eleftheriades G.V. Overcoming the diffraction limit with a planar left-handed transmission-line lens. *Physical Review Letters*, 92(11), 2004.
- Guenneau S., Amra C., y Veynante D. Transformation thermodynamics: cloaking and concentrating heat flux. *Opt. Express*, 20:8207–8218, 2012.

- Guenneau S. y Puvirajesinghe T.M. Fick's second law transformed: One path to cloaking in mass diffusion. *J. R. Soc. Interface*, 10:20130106, 2013.
- Han T., Bai X., Gao D., Thong J.T.L., Li B., y Qiu C.W. Experimental demonstration of a bilayer thermal cloak. *Physical Review Letters*, 112(5), 2014. doi:10.1103/physrevlett.112.054302.
- Han T., Yuan T., Li B., y Qiu C. Homogeneous thermal cloak with constant conductivity and tunable heat localization. *Sci. Rep.*, 3, 2013.
- Hashin Z. y Shtrikman S. A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials. *J. Appl. Phys.*, 33(10):3125–3131, 1962.
- Hopkins D.C., Baltis T., Pitaress J.M., y Hazelmyer D.R. Extreme thermal transient stress analysis with pre-stress in a metal matrix composite power package. *Additional Conferences (Device Packaging, HiTEC, HiTEN, & CICMT)*, 2012(HITEC):000361–000372, 2012. doi:10.4071/hitec-2012-tha25.
- Hostos J.C.Á., Fachinotti V.D., y Peralta I. Metamaterial for elastostatic cloaking under thermal gradients. *Scientific Reports*, 9(1), 2019. doi:10.1038/s41598-019-40517-6.
- Houck A.A., Brock J.B., y Chuang I.L. Experimental observations of a left-handed material that obeys snell's law. *Physical Review Letters*, 90(13), 2003.
- Hu R., Wei X., Hu J., y Luo X. Local heating realization by reverse thermal cloak. *Scientific Reports*, 4(1), 2014. doi:10.1038/srep03600.
- Kachanov M. y Sevostianov I. On quantitative characterization of microstructures and effective properties. *Int. J. Solids and Structures*, 42:309–336, 2005.
- Kadic M., Bückmann T., Stenger N., Thiel M., y Wegener M. On the practicability of pentamode mechanical metamaterials. *Applied Physics Letters*, 100(19):191901, 2012. doi:10.1063/1.4709436.
- Kadic M., Bückmann T., Schittny R., y Wegener M. Metamaterials beyond electromagnetism. *Rep. Prog. Phys.*, 76(12):126501, 2013.
- Kocvara M. y Stingl M. Free material optimization for stress constraints. *Struct. Multidisc. Optim.*, 33:323–335, 2007.
- Lakes R. Foam structures with a negative poisson's ratio. *Science*, 235:1038–1041, 1987.
- Landy N. y Smith D.R. A full-parameter unidirectional metamaterial cloak for microwaves. *Nature Materials*, 12(1):25–28, 2012. doi:10.1038/nmat3476.
- Leonhardt U. Optical conformal mapping. *Science*, 312:1777–1780, 2006.
- Li J.Y., Gao Y., y Huang J.P. A bifunctional cloak using transformation media. *Journal of Applied Physics*, 108(7):074504, 2010. doi:10.1063/1.3490226.
- Lindman K.F. Über eine durch ein isotropes system von spiralförmigen resonatoren erzeugte rotationspolarisation der elektromagnetischen wellen. *Annalen der Physik*, 368(23):621–644, 1920. doi:10.1002/andp.19203682303.
- Liu R., Ji C., Mock J.J., Chin J.Y., Cui T.J., y Smith D.R. Broadband ground-plane cloak. *Science*, 323(5912):366–369, 2009. doi:10.1126/science.1166949.
- Liu Y., Guo W., y Han T. Arbitrarily polygonal transient thermal cloaks with natural bulk materials in bilayer configurations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 115:1–5, 2017. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.07.032.

- Lund E. y Stegmann J. On structural optimization of composite shell structures using a discrete constitutive parametrization. *Wind Energy*, 8(1):109–124, 2005.
- Ma Y., Lan L., Jiang W., Sun F., y He S. A transient thermal cloak experimentally realized through a rescaled diffusion equation with anisotropic thermal diffusivity. *NPG Asia Materials*, 5(11):e73–e73, 2013. doi:10.1038/am.2013.60.
- Maldovan M. Sound and heat revolutions in phononics. *Nature*, 503:209–217, 2013.
- Marler R.T. y Arora J.S. The weighted sum method for multi-objective optimization: new insights. *Struct. Multidisc. Optim.*, 41:853–862, 2010.
- Maxwell J.C. y Thompson J.J. *A Treatise on Electricity and Magnetism*. (Clarendon Press Series bd. 1) (Oxford: Clarendon), 1904.
- Michell A. Lviii. the limits of economy of material in frame-structures. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 8(47):589–597, 1904.
- Milton G., Briane M., y Willis J. On cloaking for elasticity and physical equations with a transformation invariant form. *New J. Phys.*, 8, 2006.
- Milton G.W. *The theory of composites*. Cambridge University Press, 2004.
- Narayana S. y Sato Y. Heat flux manipulation with engineered thermal materials. *Phys. Rev. Lett.*, 108(21):214303, 2012.
- Narayana S., Savo S., y Sato Y. Transient heat flux shielding using thermal metamaterials. *Appl. Phys. Lett.*, 102:201904, 2013.
- Nicolet A., Zolla F., y Guenneau S. Electromagnetic analysis of cylindrical cloaks of an arbitrary cross section. *Optics Letters*, 33(14):1584, 2008. doi:10.1364/ol.33.001584.
- Nithiarasu P., Lewis R.W., y Seetharamu K.N. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Mass Transfer*. John Wiley and Sons Ltd, 2016. ISBN 047075625X.
- Norris A.N. y Shuvalov A.L. Elastic cloaking theory. *Wave Motion*, 48:525–538, 2011.
- Pendry J., Holden A., Robbins D., y Stewart W. Magnetism from conductors and enhanced nonlinear phenomena. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 47(11):2075–2084, 1999. doi:10.1109/22.798002.
- Pendry J., Schurig D., y Smith D. Controlling electromagnetic fields. *Science*, 312(5781):1780–1782, 2006.
- Pendry J.B., Holden A.J., Stewart W.J., y Youngs I. Extremely low frequency plasmons in metallic mesostructures. *Physical Review Letters*, 76(25):4773–4776, 1996. doi:10.1103/physrevlett.76.4773.
- Peralta I., Fachinotti V., y Ciarbonetti A. Optimization-based design of a heat flux concentrator. *Sci. Rep.*, 7(40591), 2017.
- Perez R.E., Jansen P.W., y Martins J.R.R.A. pyOpt: A Python-based object-oriented framework for non-linear constrained optimization. *Structures and Multidisciplinary Optimization*, 45(1):101–118, 2012. doi:10.1007/s00158-011-0666-3.
- Popa B.I. y Cummer S.A. Cloaking with optimized homogeneous anisotropic layers. *Physical Review A*, 79(2), 2009. doi:10.1103/physreva.79.023806.
- Post E.J. *Formal Structure of Electromagnetics: General Covariance and Electromagnetics*. (Amsterdam: North-Holland) (Dover Paperback), 1997.

- Restrepo-Flórez J.M. y Maldovan M. Mass separation by metamaterials. *Sci. Rep.*, 6:21971, 2016.
- Rungsiyakull C., Li Q., Sun G., Li W., y Swain M.V. Surface morphology optimization for osseointegration of coated implants. *Biomaterials*, 31:7196–7204, 2010.
- 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.
- Schittny R., Niemeyer A., Mayer F., Naber A., Kadic M., y Wegener M. Invisibility cloaking in light-scattering media. *Laser Photonics Rev.*, 10(3):382–408, 2016.
- Schurig D., Mock J.J., Justice B.J., Cummer S.A., Pendry J.B., Starr A.F., y Smith D.R. Metamaterial electromagnetic cloak at microwave frequencies. *Science*, 314(5801):977–980, 2006. doi:10.1126/science.1133628.
- Shalaev V.M., Cai W., Chettiar U.K., Yuan H.K., Sarychev A.K., Drachev V.P., y Kildishev A.V. Negative index of refraction in optical metamaterials. *Optics Letters*, 30(24):3356, 2005. doi:10.1364/ol.30.003356.
- Shamonina E. y Solymar L. Metamaterials: How the subject started. *Metamaterials*, 1:12–18, 2007.
- Shelby R.A. Experimental verification of a negative index of refraction. *Science*, 292(5514):77–79, 2001.
- Shibukawa T., Gupta V., Turner R., Dillon J., y Tobolsky A. Temperature dependence of shear modulus and density of nylon-6. *Textile Research Journal*, 32(12):1011–1012, 1962. doi:10.1177/004051756203201208.
- Sigmund O. Morphology-based black and white filters for topology optimization. *Struct. Multidisc. Optim.*, 33:401–424, 2007.
- Sigmund O. y Torquato S. Composites with extremal thermal expansion coefficients. *Appl. Phys. Lett.*, 69(21):3203–3205, 1996.
- Sigmund O. y Torquato S. Design of materials with extreme thermal expansion using a three-phase topology optimization method. *J. Mech. Phys. Solids*, 45:1037–1067, 1997.
- Sihvola A. Metamaterials in electromagnetics. *Metamaterials*, 1:1–11, 2007.
- Smith D.R., Padilla W.J., Vier D.C., Nemat-Nasser S.C., y Schultz S. Composite medium with simultaneously negative permeability and permittivity. *Physical Review Letters*, 84(18):4184–4187, 2000. doi:10.1103/physrevlett.84.4184.
- Stegmann J. y Lund E. Discrete material optimization of general composite shell structures. *Int. J. Numer. Meth. Engng*, 62:2009–2027, 2005.
- Stenger N., Wilhelm M., y Wegener M. Experiments on elastic cloaking in thin plates. *Physical Review Letters*, 108(1), 2012. doi:10.1103/physrevlett.108.014301.
- Theocaris P.S., Stavroulakis G.E., y Panagiotopoulos P.D. Negative poisson's ratios in composites with star-shaped inclusions: a numerical homogenization approach. *Archive of Applied Mechanics*, 67(4):274–286, 1997.
- Tong X.C. *Functional Metamaterials and Metadevices*. Springer International Publishing, 2018. doi:10.1007/978-3-319-66044-8.
- Tortorelli D.A. y Michaleris P. Design sensitivity analysis: Overview and review. *Inverse Problems in Engineering*, 1(1):71–105, 1994.

- Tsukrov I. y Kachanov M. Effective moduli of an anisotropic material with elliptical holes of arbitrary orientational distribution. *Int. J. Solids and Structures*, 37:5919–5941, 2000.
- Valentine J., Li J., Zentgraf T., Bartal G., y Zhang X. An optical cloak made of dielectrics. *Nature Materials*, 8(7):568–571, 2009. doi:10.1038/nmat2461.
- Vasiliev V.V. y Morozov E.V. *Advanced Mechanics of Composite Materials and Structural Elements*. Elsevier, 2013. ISBN 978-0-08-098231-1.
- Vemuri K., Canbazoglu F., y Bandaru P. Guiding conductive heat flux through thermal metamaterials. *Appl. Phys. Lett.*, 105(193904), 2014.
- Vemuri K.P. y Bandaru P.R. Geometrical considerations in the control and manipulation of conductive heat flux in multilayered thermal metamaterials. *Appl. Phys. Lett.*, 103:133111, 2013.
- Wächter A. y Biegler L. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Program., Ser. A*, 106:25–57, 2006.
- Wegener M. Metamaterials beyond optics. *Science*, 342(6161):939–940, 2013. doi:10.1126/science.1246545.
- Willis J.R. Variational principles for dynamic problems for inhomogeneous elastic media. *Wave Motion*, 3:1–11, 1981.
- Xi S., Chen H., Zhang B., Wu B.I., y Kong J.A. Route to low-scattering cylindrical cloaks with finite permittivity and permeability. *Physical Review B*, 79(15), 2009. doi:10.1103/physrevb.79.155122.
- Xu H., Shi X., Gao F., Sun H., y Zhang B. Ultrathin three-dimensional thermal cloak. *Physical Review Letters*, 112(5), 2014. doi:10.1103/physrevlett.112.054301.
- Zhang B., Luo Y., Liu X., y Barbastathis G. Macroscopic invisibility cloak for visible light. *Physical Review Letters*, 106(3), 2011a. doi:10.1103/physrevlett.106.033901.
- Zhang S., Xia C., y Fang N. Broadband acoustic cloak for ultrasound waves. *Physical Review Letters*, 106(2), 2011b. doi:10.1103/physrevlett.106.024301.
- Zhang S., Xia C., y Fang N. Broadband acoustic cloak for ultrasound waves. *Phys. Rev. Lett.*, 106:024301, 2011c.
- Zheludev N.I. The road ahead for metamaterials. *Science*, 328:582–583, 2010.
- Zheludev N.I. y Kivshar Y.S. From metamaterials to metadevices. *Nature Materials*, 11(11):917–924, 2012. doi:10.1038/nmat3431.
- Zheng X., Lee H., Weisgraber T., Shusteff M., DeOtte J., Duoss E., Kuntz J., Biener M., Ge Q., Jackson J.A., Kucheyev S., Fang N., y Spadaccini C. Ultralight, ultrastiff mechanical metamaterials. *Science*, 344:1373–1377, 2014.
- Zienkiewicz O.C. y Taylor R.L. *The finite element method*, volumen 1: The basis. Butterworth-Heinemann, 2000.
- Zigoneanu L., Popa B.I., y Cummer S.A. Three-dimensional broadband omnidirectional acoustic ground cloak. *Nature Materials*, 13(4):352–355, 2014. doi:10.1038/nmat3901.

Doctorado en Ingeniería
Mención mecánica computacional

Título de la obra:

**Diseño computacional de materiales
con aplicaciones térmicas y mecánicas**

Autor: Ignacio Peralta

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

Diseño computacional, metamateriales,
metadispositivos, manipulación de flujo térmico,
camuflaje térmico, camuflaje mecánico,
optimización, optimización topológica,
optimización discreta de material.