

# El método de Newton para la optimización de una nueva ecuación constitutiva para la fluencia plástica dependiente de la deformación. Aplicación a las aleaciones de magnesio AZ80 y AZ61<sup>(\*)</sup>

V. Gutiérrez\*, I. Rieiro\*, M. Carsí\*\* y O.A. Ruano\*\*

## Resumen

Se ha desarrollado un nuevo algoritmo numérico, basado en el método de Newton, para la optimización de los parámetros de una nueva ecuación constitutiva, dependiente de la deformación, derivada de la ecuación de Garofalo. El ajuste es directo, con algoritmos de segundo orden, de una ecuación derivada de la de Garofalo con una función objetivo no lineal. Este nuevo algoritmo de optimización ha sido aplicado a los datos de fluencia de dos aleaciones de magnesio, AZ80 y AZ61, con un comportamiento plástico inusual, existiendo una pseudo-estacionariedad en algunas de las curvas estudiadas, en el sentido de que no se manifiestan de forma evidente los estados usuales de deformación. Se han obtenido los parámetros de la nueva ecuación constitutiva, dependiente de la deformación, para estas aleaciones. Para el análisis de la precisión de los parámetros y de la exactitud de la modelización de las curvas tensión-deformación, se ha aplicado un tratamiento estadístico que permite valorar la calidad de la ecuación constitutiva propuesta y la consistencia de estos parámetros. Se han comparado curvas tensión-deformación con los resultados de la modelización, alcanzando un buen acuerdo entre los datos experimentales y los resultantes de la modelización.

## Palabras clave

Métodos numéricos; Ecuación de Garofalo; Ecuación constitutiva; Modelización; Análisis estadístico; Aleación de magnesio; Fluencia plástica.

# Newton method for the optimization of a new constitutive equation for the plastic flow dependent on the strain. Application to magnesium alloys AZ80 and AZ61

## Abstract

A new numerical algorithm has been developed, based on Newton's method, for optimizing the parameters of a new strain dependent constitutive equation, based on the Garofalo equation. The adjustment is direct, with second order algorithms, for an equation derived from that of Garofalo with a nonlinear objective function. This new optimization algorithm has been applied to creep data of two magnesium alloys AZ80 and AZ61, having an unusual plastic behavior. A certain pseudo-stationary exists in the curves studied, in the sense that the usual deformation states are not manifested in an obvious way. The parameters of the new constitutive equation, dependent on strain, have been determined for these alloys. For analyzing the precision of the parameters and the accuracy of modeling of the stress-strain curves, a statistical treatment has been applied which allows assessing the quality of the constitutive equation proposed and the consistency of these parameters. Stress-strain curves have been compared with the modeling results, reaching a good agreement between the experimental data and the resulting modeling.

## Keywords

Numerical methods; Garofalo equation; Constitutive equation; Modeling; Statistical analysis; Magnesium alloys; Creep

## 1. INTRODUCCIÓN

Históricamente se han propuesto, entre otros, tres modelos generales para el estudio de la fluencia plástica<sup>[1]</sup>, para valores constantes de deformación en

estado estacionario. Las ecuaciones de estos modelos se dan en la tabla I. Para ajustar los parámetros de estos modelos con software comercial o con métodos tradicionales se han de utilizar en muchos casos procedimientos simplificadores del problema como por

(\*) Trabajo recibido el día 4 de abril de 2013 y aceptado en su forma final el día 20 de junio de 2013.

\* Dpto. de Matemáticas, Universidad de Castilla-La Mancha, Avda. Carlos III s/n, 45071 Toledo, España. E-mail: [Ignacio.Rieiro@uclm.es](mailto:Ignacio.Rieiro@uclm.es)

\*\* Dpto. de Metalurgia Física, Centro Nacional de Investigaciones Metalúrgicas, CENIM, CSIC, Avda. Gregorio del Amo nº 8, 28040 Madrid, España. E-mail: [ruano@cenim.csic.es](mailto:ruano@cenim.csic.es)

ejemplo fijar un valor  $\alpha = \alpha_0$ , para resolverlos<sup>[2 y 3]</sup>, lo que equivale a reducir la dimensión del problema de optimización.

La ecuación de Garofalo (Ec. (1)) ha sido usada, históricamente, para estudiar el comportamiento de deformación de materiales metálicos policristalinos en un amplio intervalo de temperaturas y velocidad de deformación<sup>[4]</sup>, donde A, Q, n y  $\alpha$  son los parámetros que caracterizan el material. Su estructura matemática permite ampliar los rangos de temperaturas, velocidades de deformación y tensiones. En particular, la ecuación de Garofalo amplía todos los rangos que cubren parcialmente los modelos de la tabla I.

$$\dot{\epsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} \sinh^n(\alpha\sigma) \quad (1)$$

Debido a la no linealidad de la ecuación (1), numerosos autores<sup>[5 y 6]</sup>, han acudido también a simplificaciones numéricas para su resolución, como por ejemplo prefijar los valores de Q y/o n, para posteriormente ajustar el resto de parámetros. Tradicionalmente y con éxito en sus resultados numéricos, McQueen<sup>[5 y 7]</sup> ha estimado un valor  $\alpha = \alpha_0$ , ligado a varios tipos de familias de aleaciones y, empíricamente basándose en trabajos previos, obtuvo el resto de los parámetros. Es destacable el trabajo de Poirier<sup>[2 y 3]</sup> donde afronta métodos numéricos de super relajación a partir de un conjunto de N ecuaciones no lineales, siendo N el número de curvas del experimento, a diferencia de lo que es usual en los últimos diez años, en los que se trabaja optimizando como función objetivo la función error.

En la última década se ha procedido a la optimización de la ecuación (1) en  $R^4$  a partir de la función error cuadrático medio, definida a partir de las diferencias entre los datos experimentales y los modelizados y, por tanto, sin necesidad de fijar un valor  $\alpha = \alpha_0$ . En esta línea de investigación el método RCR {Rieiro-Carsí-Ruano} ha sido un referente hasta el momento, usándose para explicar y predecir los valores de fluencia plástica de materiales metálicos policristalinos<sup>[8]</sup>. En esta misma línea, se pueden mencionar otros trabajos que presentan diferente metodo-

logía, pero que, no obstante, validan la orientación general de este estudio<sup>[9-13]</sup>.

Por otro lado, se ha desarrollado una nueva ecuación dependiente de la deformación, derivada de la ecuación de Garofalo, que tiene la forma siguiente<sup>[14]</sup>:

$$\dot{\epsilon} = A(\epsilon) e^{-\frac{Q(\epsilon)}{RT}} \sinh^{n(\epsilon)}(\alpha(\epsilon) \cdot \sigma) \quad (2)$$

Esta ecuación es capaz de reproducir curvas tensión-deformación “( $\sigma$ - $\epsilon$ )” con una correcta precisión estadística y susceptible de ser usada para predecir las características microestructurales de la deformación plástica de los materiales metálicos.

Para ajustar la ecuación (2) con software comercial se han de efectuar aproximaciones inadecuadas, debido a su alta no linealidad, lo que complica enormemente el cálculo numérico. Se ha usado el método RCR, como referente para resolver una aproximación linealizada derivada de la ecuación (2) con el objeto de determinar los mejores valores de los parámetros que definen la ecuación mencionada<sup>[15]</sup>.

El método RCR se basa en una aproximación local de primer orden, para la función de error objetivo, lo que determina el procedimiento numérico de optimización. La expresión de la matriz usada en el desarrollo del algoritmo del método RCR, es una matriz semidefinida positiva siempre, por lo que el método es convexo (en realidad es cóncavo y convexo como corresponde a un plano) y su solución es un óptimo global para cada valor de  $\alpha = \alpha_0$ , siendo el ajuste sobre  $R^3$ . Esto siempre en la aproximación de primer orden que puede enmascarar posibles soluciones óptimas a las que no puede acceder, y en sentido también de que el mínimo de los óptimos globales no tiene por qué ser el óptimo global sobre  $R^4$ . Por tanto, esta aproximación del método RCR no tiene en cuenta, por su propia construcción, términos de segundo orden. En el caso, posible, de que los términos de segundo orden sean significativos, lo que está ligado a que el problema no sea “suave”, o bien a que los errores experimentales hagan no despreciable estos términos de segundo orden no considerados, los resul-

**Tabla I.** Algunos modelos propuestos históricamente para el estudio de la fluencia

*Table I. Some models proposed historically for the study of the plastic flow*

$\dot{\epsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} (\alpha\sigma)^n$	$\dot{\epsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} \left(\frac{e^{\alpha\sigma}}{2}\right)^n$	$\dot{\epsilon} = A e^{-\frac{Q}{RT}} \left(\frac{e^{\alpha\sigma} - 1}{2}\right)^n$
---	--	--

tados del método RCR, pueden ser poco precisos, debido al mal condicionamiento entre los datos experimentales y el modelo.

Si se quiere que la ecuación (2) reproduzca la curva experimental es necesario obtener un buen ajuste de sus parámetros. Más aún, si además de los resultados de esta modelización, se pretende obtener parámetros ligados a los procesos de endurecimiento-ablandamiento del material, como por ejemplo procesos de recristalización dinámica RDX<sup>[14-18]</sup>, y a partir de ellos predecir parámetros finales de la microestructura del material. Para todo ello la precisión del procedimiento algorítmico de optimización será muy importante. Este es el objetivo final que justifica esta línea de trabajo. En este caso, precisamos que el método numérico básico, para la determinación de los coeficientes evolutivos con la deformación de la ecuación (2), sea seguro, preciso y exacto, tanto cuanto sea posible. Ello obliga a profundizar en los métodos numéricos, en los procedimientos de optimización y en los algoritmos de implementación de los métodos.

Una vez alcanzado este punto, se hace necesario utilizar un método numérico de optimización de forma masiva para sucesivos valores de  $\epsilon$ . En este trabajo se ha desarrollado un método ad-hoc, que llamaremos RGCR (Rieiro, Gutiérrez, Carsí y Ruano)-Newton, basado en el método de optimización de Newton para mínimos cuadrados no lineales, en el que se desarrolla la algorítmica necesaria para optimizar los parámetros de la ecuación (2), con los requerimientos de precisión, exactitud, estabilidad, convergencia y velocidad de convergencia necesarios. Así, se tiene un nuevo algoritmo de optimización aplicando el método de Newton, obteniendo  $\{A_{\text{óptimo}}, Q_{\text{óptimo}}, n_{\text{óptimo}}, \alpha_{\text{óptimo}}\}$  que hacen mínima la función diferencia, o función error (SSE), entre los valores experimentales y los valores esperados por la ecuación (2).

Además, se ha desarrollado un test de control que debe ir asociado a estos trabajos matemáticos de optimización. Este test es necesario para garantizar la fiabilidad general del procedimiento, y además aporta datos necesarios sobre la precisión, la velocidad de convergencia y/o las limitaciones de dicho procedimiento.

Hay dos grandes líneas al respecto de los tests de control. Una de ellas utiliza un conjunto de funciones multivariantes dependientes de los parámetros en forma no lineal, y suficientemente conocidas, con óptimos globales conocidos y múltiples óptimos locales, con difíciles caminos para la convergencia y suficientemente “no suaves” como para poner en cuestión métodos no seguros. Así por ejemplo se usan las funciones de Rosembruck, la función “banana”,

Rastringin, De Johns, Schwefel, Salomon que se pueden observar en trabajos clásicos de Neumaier y otros<sup>[19-23]</sup>.

Otra línea consiste en generar una base de datos a partir de la expresión de la función objetivo, con unos parámetros suficientemente “extremados” como para forzar los problemas de precisión, exactitud y convergencia del método. La generación de los datos se hace inicialmente sin ruido y con sucesivos niveles de ruido generado estocásticamente mediante funciones aleatorias ad-hoc. Posteriormente se aplica el método a validar sobre esta base de datos y se analizan las soluciones obtenidas, así como: su aproximación a los verdaderos valores, la aparición de valores no deseados, la convergencia y su velocidad. Dados los objetivos de este trabajo se ha elegido, por su eficacia y eficiencia, el segundo procedimiento. Por tanto, se ha realizado un test de control “*benchmark*” para la cualificación del código con el que se ha programado el algoritmo de optimización no lineal.

Se ha aplicado el método RGCR-Newton a la simulación de conformado mediante ensayos de torsión de dos aleaciones de magnesio, la AZ80 y la AZ61. Estas aleaciones son complejas desde el punto de vista mecánico, presentan una ductilidad limitada y en las condiciones de conformado muestran recristalización dinámica. Esto provoca unas curvas tensión-deformación inusuales ya que la evolución desde el pico hasta el comienzo de la zona de ruptura es decreciente y cóncava, algo que pone a prueba de una forma intensa la validez de los métodos que vamos a aplicar.

## 2. APLICACIÓN DEL MÉTODO RGCR-NEWTON PARA RESOLVER LA ECUACIÓN CONSTITUTIVA A PARTIR DE LA ECUACIÓN DE GAROFALO

El método RCR<sup>[24 y 25]</sup>, basado en Gauss-Newton, fue desarrollado ad hoc para la optimización de la expresión logarítmica y no logarítmica de la ecuación (2). En este trabajo se ha desarrollado un nuevo algoritmo que denominamos RGCR-Newton, capaz de optimizar la ecuación (2) directamente, sin necesidad de transformarla, ni de utilizar aproximaciones de primer orden. El nuevo algoritmo está basado en el método de Newton<sup>[22-29]</sup>; se trata de un problema de optimización no lineal al que se le ha aplicado un desarrollo aproximativo de segundo orden.

Se define la función de error, SSE como la función objetivo:

$$SSE(\vec{\theta}) = \left\| \xi(\vec{x}_t, \vec{\theta}) \right\|^2 = \left\| y_t - f(\vec{x}_t, \vec{\theta}) \right\|^2 \quad (3)$$

siendo  $y_t$  el valor experimental de la velocidad de deformación y  $f(*,*)$  la expresión dada por la ecuación (2). En la ecuación (3) la expresión de  $x_t = (x_1, x_2) = (1/RT, \sigma)$  y la de  $\vec{\theta} = (\theta_1, \theta_2, \theta_3, \theta_4) = (A, Q, \alpha, n)$  se suponen para cada valor de  $\epsilon$  dado.

El método de RGCR-Newton se basa, como se ha mencionado, en un desarrollo de Taylor de segundo orden sobre una función objetivo, que en nuestro caso es la ecuación (3), de la siguiente forma:

$$SSE_T(\vec{\theta}) = SSE(\vec{\theta}^{(k)}) + \frac{\partial SSE(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta}^T} \cdot (\vec{\theta} - \vec{\theta}^{(k)}) + \frac{1}{2} (\vec{\theta} - \vec{\theta}^{(k)})^T \cdot \frac{\partial^2 SSE(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} (\vec{\theta} - \vec{\theta}^{(k)}) + \xi \quad (4)$$

$$\text{Asumiendo que en el óptimo } \frac{\partial SSE_T(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta}^T} = 0$$

lo que, al aplicarlo a la ecuación (3), permite inferir que:

$$\frac{\partial SSE_T(\vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}^T} = \frac{\partial SSE(\vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}^T} + \frac{\partial^2 SSE(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} \cdot (\vec{\theta} - \vec{\theta}^{(k)}) = 0 \quad (5)$$

Haciendo que  $\vec{\theta} = \vec{\theta}^{(k+1)}$  y despejando  $\theta^{(k+1)}$  de la ecuación (5) se puede obtener la siguiente ecuación recursiva:

$$\vec{\theta}^{(k+1)} = \vec{\theta}^{(k)} + \vec{D}^{(k)} = \vec{\theta}^{(k)} + \left[ \frac{\partial^2 SSE(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} \right]^{-1} \cdot \left[ \frac{\partial^2 SSE(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta}^T} \right] \quad (6)$$

En la ecuación (6) se tiene la expresión del Jacobiano y del Hessiano de la función objetivo SSE. Las expresiones detalladas de ambos se pueden observar en las ecuaciones (7) y (8).

$$\left[ \frac{\partial SSE(\vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}^T} \right] = -2 [y_t - f(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)})]^T F(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)}) \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 SSE(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} = - [2 \cdot F^T(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)}) \cdot F(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)})]$$

$$-2 \sum_{i=1}^{i=n} [y_i - f(\vec{x}_i, \vec{\theta}^{(k)})] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} (f(\vec{x}_i, \vec{\theta}^{(k)})) \quad (8)$$

siendo  $F(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)})$ , el gradiente de la función  $f(\vec{x}_t, \vec{\theta})$  de la ecuación (3). La ecuación (7) constituye un desarrollo de Gauss-Newton y es la base teórica del método RCR, cuando la ecuación (8) solo incluye el primer sumando. Con el método de RGCR-Newton se introduce el término del Hessiano, y en él se consideran los dos términos de la ecuación (8). En él estriba, numéricamente hablando, la diferencia entre ambos métodos. Existen otras diferencias algorítmicas que hacen que en el método RGCR, no se fije, en ningún caso, el valor  $\alpha = \alpha_0$ .

Es reseñable que el término dado por la matriz  $F^T(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)}) \cdot F(\vec{x}_t, \vec{\theta}^{(k)})$  en las expresiones semi-linealizadas, es semi-definido positivo, y por lo tanto si solo se usa dicho término, como es el caso de métodos basados en aproximaciones de Gauss-Newton de primer orden, como el RCR, la solución de la ecuación (7) sería un óptimo global del método aproximativo para la ecuación (2). Pero ese óptimo global en el método RCR, pudiera ser un óptimo global espurio, basándose en la aproximación o la pseudo linealización. Dada una base de datos experimental, si se selecciona una función adecuada para este conjunto de datos, es posible que esta función realmente debiera ser no lineal, exponencial por ejemplo. Pero si no hay un buen conocimiento de la forma de la función, es posible seleccionar una función lineal. Posteriormente, cuando se haya ajustado esta función lineal a los datos experimentales, es posible que el resultado no sea bueno en un sentido de inferencia, pero la función lineal obtenida por medio del método de optimización sería un óptimo global.

La diferencia entre RCR-Gauss-Newton y RGCR-Newton radica en el segundo sumando de la ecuación (8) que se ha aislado, como ecuación (9) para su análisis:

$$\left[ \sum_{i=1}^{i=n} [y_i - f(\vec{x}_i, \vec{\theta}^{(k)})] \cdot \frac{\partial^2}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} (f(\vec{x}_i, \vec{\theta}^{(k)})) \right] = \sum_{i=1}^{i=n} x_i \cdot \delta_i \quad (9)$$

Este término, es una matriz, que no es en general semi-definida positiva para la expresión de la ecuación (2), como hemos verificado en trabajos anteriores<sup>[30]</sup>.

La expresión de la ecuación (8) constituye una "innovación", en sentido numérico, pues proviene de la aplicación de un método de optimización de segundo orden como es el método Newton, respecto de métodos de orden inferior. En este trabajo se quiere hacer hincapié en el significado de este término respecto a la adecuación de los datos experimentales a un modelo, a partir de su significado como medida

del error entre los datos y el modelo. En la ecuación (8) se pueden diferenciar dos factores  $\chi_i$  y  $\delta_i$ . El primero representa el error del modelo, respecto de la adecuación del mismo a los datos experimentales. Esta diferencia es mayor cuanto peor se adapta la función objetivo a las condiciones de fluencia del material. El segundo  $\delta_i$  es el Hessiano de la función  $f(\vec{x}_i, \vec{\theta}^{(k)})$ . Sus valores son mayores cuando se aplica a una función, como es este caso, en el que la variabilidad es muy intensa bien porque nos encontremos en una zona de valores extremos de la malla de datos o bien porque en dicha zona el gradiente y por tanto la dirección de descenso y el valor del módulo del gradiente, tomen valores muy elevados y variables. También es frecuente que tome valores extremos cuando las funciones sean combinaciones de funciones exponenciales. Si se elige un conjunto de valores iniciales en zonas alejadas respecto de una susceptible zona de óptimo local, es conveniente utilizar el método de Newton, ya que se trata de un método de segundo orden que converge más rápido que el Gauss-Newton, siendo absolutamente convergente en determinados radios de convergencia, y es más seguro y preciso siguiendo variaciones intensas en el proceso de descenso.

El algoritmo para el método de Newton es el siguiente:

1. Se elige un valor inicial, que está formado por un conjunto de cuatro parámetros correspondientes a la ecuación (1),  $\vec{\theta}^{(k)} = \{A, Q, n, \alpha\}$

2. Se calcula la expresión de la primera y la segunda derivada (Jacobiano y Hessiano) de la función objetivo SSE definida en la siguiente ecuación en términos del parámetros de descenso:

$$\vec{D}^{(k)} = \left[ \frac{\partial^2 \text{SSE}(\vec{\theta}^{(k)})}{\partial \vec{\theta} \partial \vec{\theta}^T} \right]^{-1} \cdot \left[ \frac{\partial \text{SSE}(\vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}^T} \right] \quad (10)$$

3. Se sigue un proceso iterativo para optimizar la ecuación (1). Al final de cada iteración se encuentra un conjunto de valores para los parámetros  $\{A, Q, n \text{ y } \alpha\}$  de la ecuación (1) que disminuyen el valor de la función cuadrática de error SSE. Este proceso iterativo se repetirá hasta que el conjunto  $\{A, Q, n \text{ y } \alpha\}$  sea el que haga mínimo el valor de SSE, esto será la diferencia sobre el valor experimental. En cada iteración se busca un paso  $\lambda^{(k)}$  [19, 28 y 29] tal que:

$$\text{SSE}(\vec{\theta}^{(k)} + \lambda^{(k)} \cdot \vec{D}^{(k)}) < \text{SSE}(\vec{\theta}^{(k)}) \quad (11)$$

4. Se encuentra  $\lambda^{(k)}$  que permite obtener el siguiente paso en la iteración:

$$\vec{\theta}^{(k+1)} = \vec{\theta}^{(k)} + \lambda^{(k)} \cdot \vec{D}^{(k)} \quad (12)$$

Luego se utiliza  $\theta^{k+1}$  como valor inicial de la siguiente iteración.

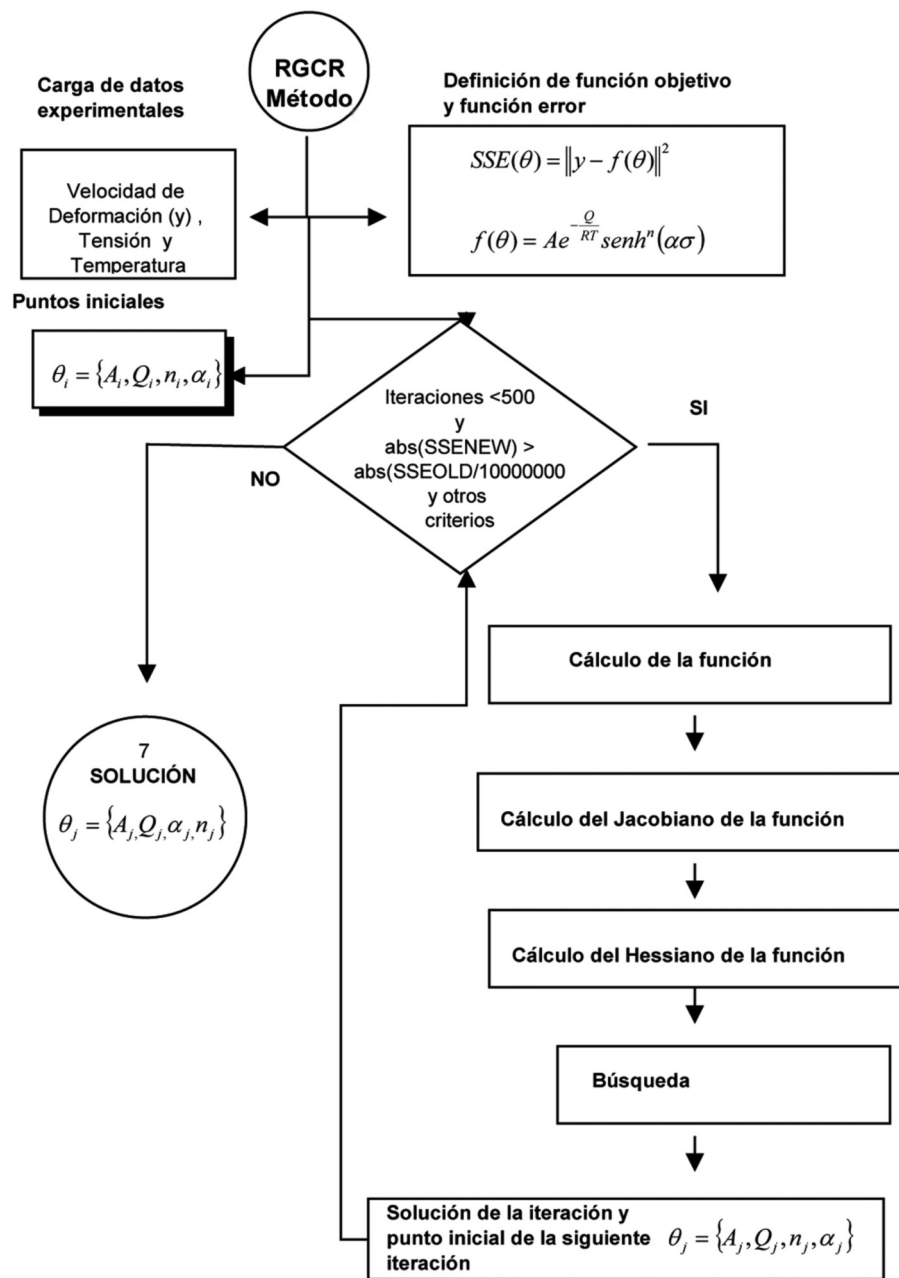
Con esta algorítmica y haciendo

$f(x_i, \vec{\theta}) = A e^{-\frac{Q}{RT}} [\text{senh}(\alpha \sigma)]^n$  en la ecuación (3) se implementa un procedimiento al que le debemos suministrar los gradientes, Jacobianos y Hessianos, analíticamente. Por lo tanto, no se trabaja con ningún error numérico de obtención de gradientes, Jacobianos o Hessianos, siendo el único error el intrínseco del proceso iterativo o los implícitos derivados del procedimiento experimental, que son los que más interesan debido a que con el método RCR era más difícil identificar la etiología de las fuentes de error. La utilización conjunta sobre un experimento de los dos métodos RCR y RGCR, puede permitir un diagnóstico preciso de las fuentes de error. El diagrama de flujo de los algoritmos usados en el estudio para la optimización de los parámetros de la ecuación de Garofalo viene dado en la figura 1.

Existen numerosos métodos tanto para la optimización unidimensional como para el control de parada. Muchos de ellos son altamente sofisticados y complejos, y no se justifican, en esta etapa del trabajo, ni son necesarios, en tanto que consumen numerosas masas de memoria y tiempos innecesarios cuando el objetivo es otro. En este sentido hemos utilizado el principio básico de numerosos matemáticos de métodos numéricos aplicados del ámbito anglosajón, de “si se puede hacer, hacerlo fácil” (*if you can do it, make it easy*) [27-31]. Para la optimización lineal se ha utilizado uno de los métodos más antiguos y sencillos que existen: usar una secuencia de potencias de 0,5, dando lugar a una sucesión decreciente pero suficientemente segura y cuyo límite es cero. Para la convergencia hemos usado un control doble; por una parte, un número estudiado de iteraciones suficientes, de forma acorde con las características del algoritmo y después de analizar numerosos casos y ensayar diferentes valores; por otra parte, el control sobre un “factor de sensibilidad”, formado por la diferencia relativa o absoluta entre la función de error antes de comenzar el paso nuevo y el valor de la función de error después de terminar el nuevo paso.

Para la detención y/o fijación del óptimo atendemos al número máximo de iteraciones o bien a que el factor de sensibilidad alcance un valor tal que garantice que hemos variado en un factor  $10^{\delta}$ , siendo  $\delta$  un entero suficientemente alto (frente al valor inicial del error), la función de error de una etapa (k) a la siguiente (k+1). Los órdenes de magnitud se han analizado en el test benchmark de control básico.

Nuestro método precisa un tratamiento masivo sobre mallas de valores iniciales que pueden variar entre 625 datos hasta mallas de 25.000 datos en  $R^4$ ,



**Figura 1.** Diagrama de flujo de los algoritmos usados en el estudio para la optimización de los parámetros de la ecuación de Garofalo.

*Figure 1. Flow chart of the algorithms used in the study for the optimization of the parameters of Garofalo equation.*

usualmente, o incluso en las pruebas fundamentales se ha trabajado con mallas de 100.000.000 datos. En este enfoque de tratamiento masivo del problema hace que sea superfluo un caso particular (el estudio detallado de la evolución desde un valor inicial) cuando para cada valor candidato a óptimo éste (el resultado final) es sometido a dos controles de convergencia:

- la igualdad a cero del gradiente de la función error

- el valor estrictamente positivo de los autovalores del Hessiano

Si con los procedimientos de parada, el candidato a óptimo obtenido pasa los dos controles de convergencia planteados, es al menos un óptimo local con seguridad. Si no los cumple, se desecha el candidato y se pasa al siguiente punto de la malla de “initial guess”.

El estimador de la varianza de los errores  $\epsilon_1$  asociado al estimador mínimo cuadrático  $\hat{\theta}$  viene dado por la ecuación siguiente<sup>[28]</sup>:

$$s^2 = \text{SSE}(\hat{\theta}) / (n - p) \quad (13)$$

siendo  $n$ , el número de datos de la muestra y  $p$  el número de parámetros.

Por otra parte, siguiendo también a Gallant<sup>[28]</sup>, se puede asumir, considerando el conjunto de aproximaciones utilizadas hasta aquí, que si se definen los coeficientes de correlación entre los parámetros estimados  $\hat{\theta}_i, \hat{\theta}_j$ , como  $s^2 \cdot \hat{c}_{ij} = \hat{\sigma}_i \cdot \hat{\sigma}_j \cdot \hat{\rho}_{ij}$ , de manera que como está definido  $s^2 \cdot \hat{c}_{ij} = \hat{\sigma}_i^2 \cdot 1$ , y como  $\hat{\sigma}_i = \sqrt{s^2 \cdot \hat{c}_{ii}}$ , se obtiene para el coeficiente de correlación:

$$\hat{\rho}_{ij} = \frac{s^2 \cdot \hat{c}_{ij}}{s^2 \cdot \sqrt{\hat{c}_{ij} \cdot \hat{c}_{jj}}} = \frac{\hat{c}_{ij}}{\sqrt{\hat{c}_{ij} \cdot \hat{c}_{jj}}} \quad (14)$$

La estimación de este estadístico que mide la correlación entre los parámetros estimados (Gallant<sup>[28]</sup>), permite afrontar el problema de la sobreparametrización de un modelo.

Para todo el tratamiento inferencial del problema y de acuerdo con Gallant<sup>[28]</sup> se debe estimar como la matriz de varianzas-covarianzas mediante la expresión siguiente:

$$\hat{C}^V = \hat{V} = \hat{\sigma}^2 \cdot \left( F^T(\hat{\theta}) \cdot F(\hat{\theta}) - \sum_{k=1}^{k=n} (y_k - f(x_k, \hat{\theta})) \cdot \frac{\partial^2 f(x_k, \hat{\theta})}{\partial \theta \partial \theta^T} \right)^{-1} \quad (15)$$

A partir de estos datos se pueden construir los intervalos de confianza de los parámetros<sup>[28]</sup>.

En la figura 2, se puede observar todo el esquema del análisis estadístico que se aplica al modelo RGCR-Newton.

### 3. PROCEDIMIENTO EXPERIMENTAL

La composición química de las dos aleaciones utilizadas se da en las tablas II y III.

Las barras de las aleaciones fueron obtenidas mediante extrusión a alta temperatura. Se ha llevado a cabo un proceso experimental, (ensayo de torsión), para obtener las curvas de fluencia a elevada temperatura y velocidad de deformación. El procedimiento experimental, se realizó en una máquina Setaram de torsión en caliente, ubicada en el CENIM. Los ensayos se han hecho en una máquina de torsión que trabaja en condiciones de temperatura y velocidad constantes. Los datos de temperatura fueron corregidos de calentamiento adiabático y se controlaron las temperaturas finales con un pirómetro. Se efectuaron las correcciones dinámicas pertinentes en el tratamiento de temperaturas. Se procesaron barras de 25 mm en diámetro y 1.000 mm en longitud, que fueron mecanizadas en la dirección de extrusión. Las muestras de torsión fueron de 50 mm de zona calibrada y longitud de 3 mm de radio. Los materiales han sido conformados y estudiados en condiciones similares a las industriales. El proceso de captación de datos se ha realizado registrando el par y el número de vueltas {Γ,N} para cada temperatura y velocidad. Los datos se han convertido a tensión y velocidad verdadera

**Tabla II.** Composición química de la aleación de magnesio AZ80, en porcentaje en peso. Magnesio balanceado

*Tabla II. Chemical composition of the AZ80 magnesium alloy, in weight percent. Balanced magnesium*

Al	Mn	Zn	Si	Cu	Ni	F
8,325	0,195	0,407	0,0055	0,0002	0,0005	0,0025

**Tabla III.** Composición de la aleación de magnesio AZ61, en porcentaje en peso. Magnesio balanceado

*Table III. Chemical composition of the AZ61 magnesium alloy, in weight percent. Balanced magnesium*

Zn	Al	Si	Cu	Mn	Fe	Ni
0,54	6,27	0,04	<0,001	0,32	0,003	<0,001

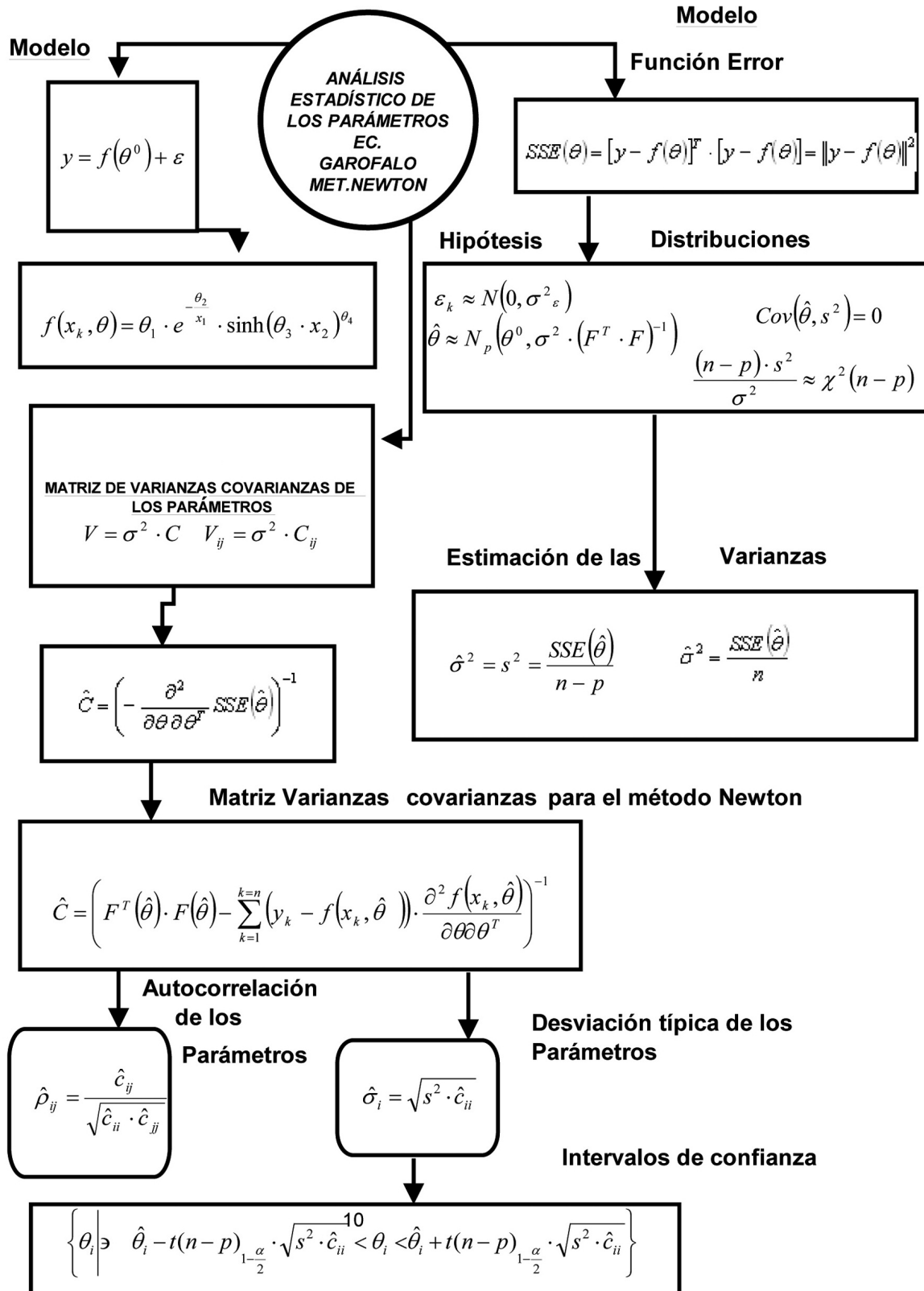


Figura 2. Diagrama de flujo del análisis estadístico aplicado al modelo RGCR-Newton.

Figure 2. Flow chart for the statistical analysis applied to the RGCR-Newton model.

mediante un método diferencial<sup>[32-34]</sup>. Los datos obtenidos en etapas previas han sido tratados de corrección

adiabática mediante un método desarrollado con anterioridad<sup>[35]</sup>.



Las diferentes probetas de la aleación de partida se sometieron a calentamientos durante media hora a temperaturas de 200, 300, 400 y 500 °C, siendo inmediatamente enfriadas por agua para así no perder la microestructura obtenida a cada temperatura.

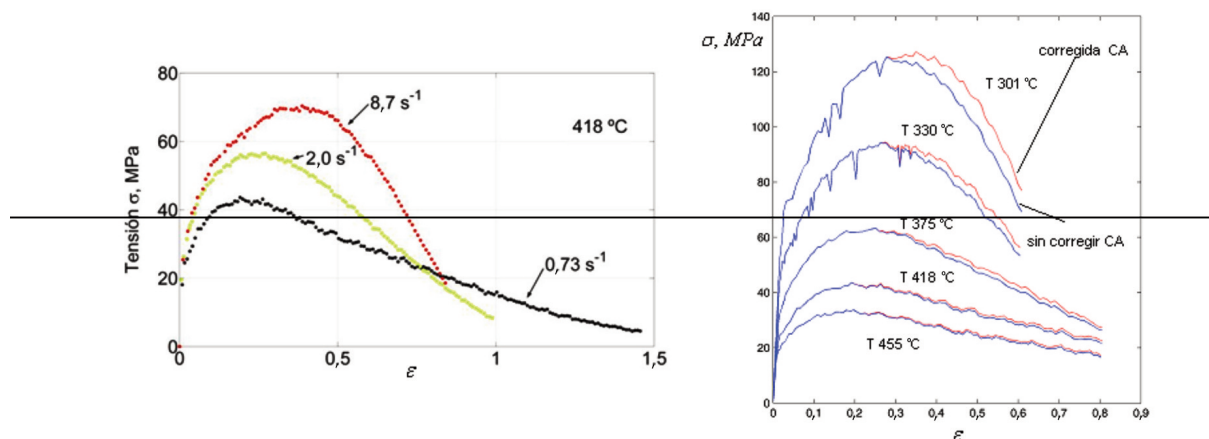
Para el presente trabajo los ensayos de torsión han sido realizados con las siguientes condiciones:

- Temperaturas de 574, 603, 648, 691 y 728 K, para la aleación AZ80.
- Temperaturas de 574, 606, 652, 696, 734 K, para la aleación AZ61.
- Velocidades de máquina 200, 550, y 1.000 r.p.m.

Después de realizar el ensayo de torsión, las probetas se han enfriado al aire. La máquina ha proporcionado los parámetros de par de torsión  $\Gamma$  y número de vueltas  $N$ . El análisis de las curvas de fluencia ha sido realizado para todas las temperaturas,

El procesamiento de los datos experimentales (obtención de las curvas tensión-deformación y de las constantes de la ecuación de Garofalo) se ha realizado según se ha descrito en otras publicaciones<sup>[17, 24 y 32]</sup>.

Se realizó un análisis de la microestructura de la barra principal de la aleación AZ61<sup>[36]</sup>, observándose que coexisten diversos tamaños de granos y precipitados en los bordes de los granos debidos a compuestos intermetálicos formados en el proceso de la colada del material. Esta presencia de precipitaciones de intermetálicos puede justificar, según se indica en la bibliografía, procesos de endurecimiento siguiendo a ablandamientos que producen una forma peculiar y característica de las curvas tensión-deformación de estos materiales.



**Figura 3.** Curvas tensión-deformación para la aleación de magnesio AZ80.

*Figure 3. Stress-Strain curves for the magnesium alloy AZ80.*

## 4. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

A modo de ejemplo, la figura 3 a) muestra curvas tensión-deformación para la aleación de magnesio AZ80 a 418 °C y diversas velocidades de deformación. La figura 3 b) muestra curvas de la misma aleación antes y después de corregirse de calentamiento adiabático.

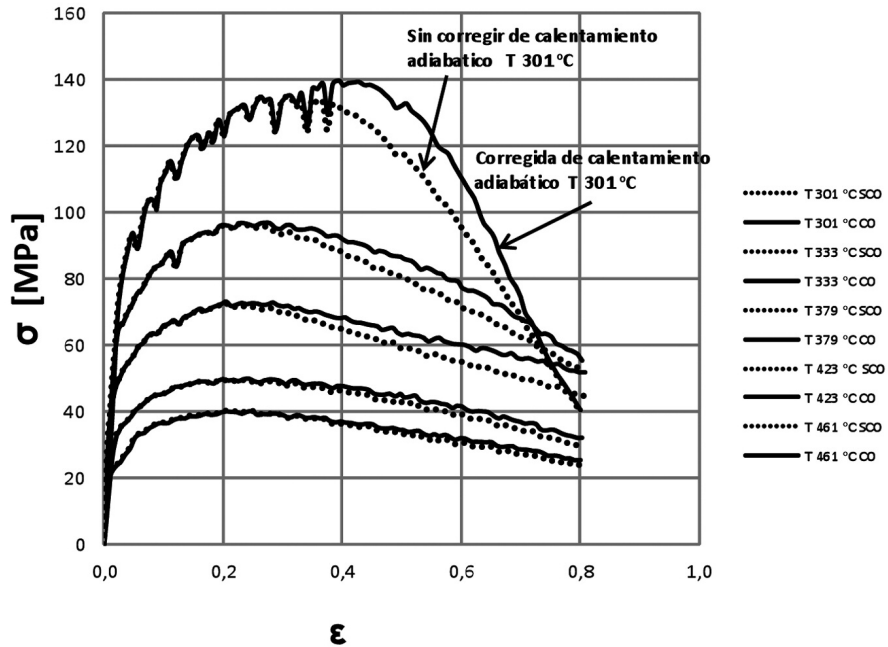
La figura 4 muestra curvas tensión-deformación de la aleación AZ61 corregidas y sin corregir de calentamiento diabático para  $\dot{\epsilon} = 2 \text{ s}^{-1}$  y distintas temperaturas.

El método desarrollado se ha aplicado a los datos obtenidos en los ensayos descritos anteriormente para cinco temperaturas y tres velocidades de deformación. En la figura 5 se representan los valores experimentales logarítmicos de velocidad de deformación frente a la tensión obtenidos para  $\epsilon = 0,4$  en la aleación AZ80.

Aplicando el método RGCR a los valores experimentales provenientes de los ensayos para la aleación de magnesio AZ80 obtenemos los valores óptimos, evolutivos con la deformación, para los parámetros de la ecuación (2). En la figura 6 se han representado los valores de  $A(\epsilon)$ ,  $Q(\epsilon)$ ,  $n(\epsilon)$  y  $\alpha(\epsilon)$  frente a  $\epsilon$ .

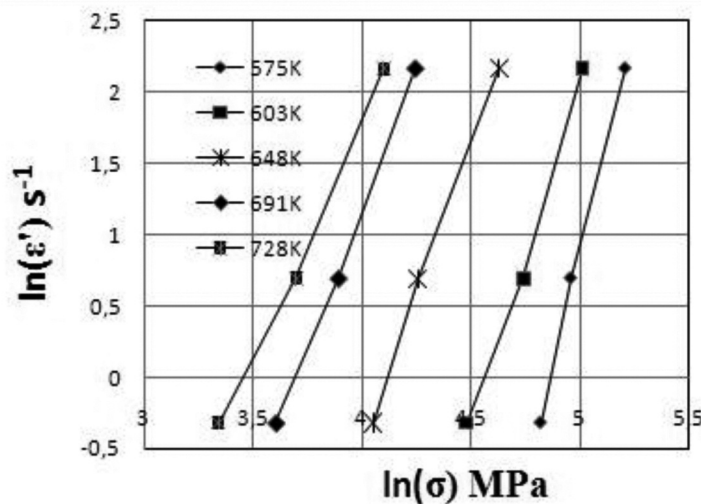
En la investigación que fundamenta este trabajo<sup>[30]</sup> se ha diseñado un análisis estadístico que, entre otros resultados, nos devuelve los intervalos de confianza de los parámetros de ecuación (2). Dichos valores se observan en la tabla IV para la aleación de magnesio AZ80. El pequeño rango de los intervalos comparados con la magnitud de los parámetros indica la alta precisión de los datos, lo que induce un buen acondicionamiento de dichos datos al modelo. Se puede observar la alta precisión

**AZ61- Curvas  $\sigma$ - $\epsilon$  corregidas y sin corregir de calentamiento adiabático para todas la temperaturas de ensayo y  $\epsilon' = 2s^{-1}$**



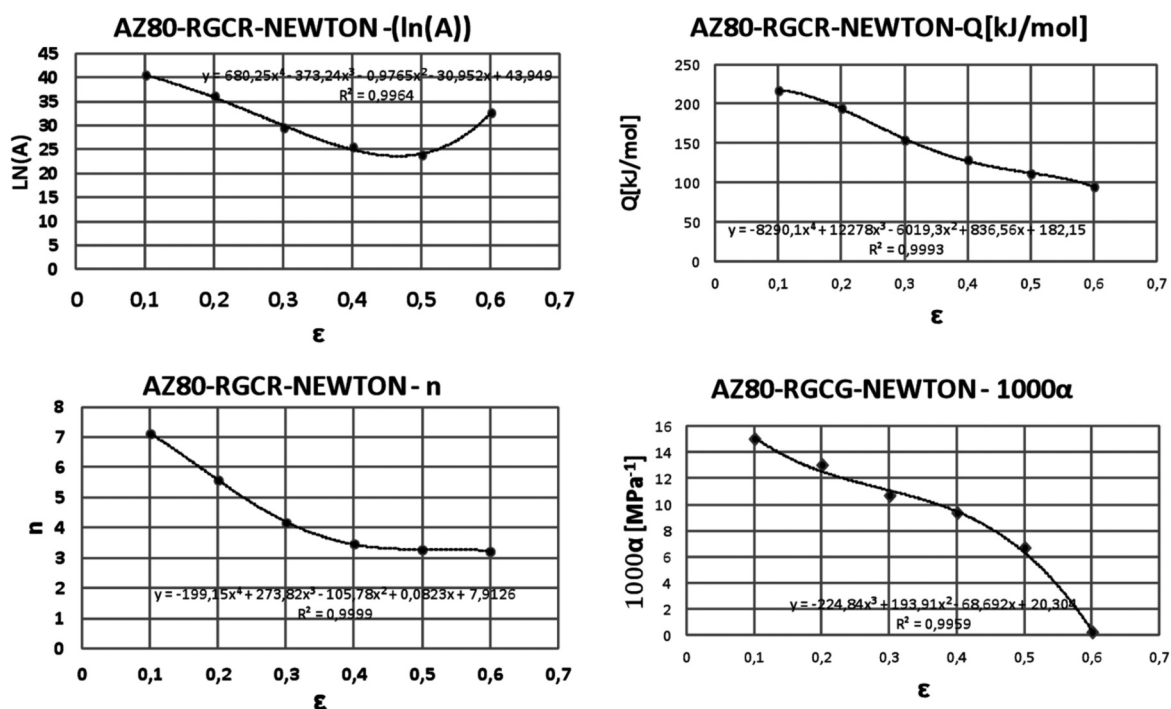
**Figura 4.** Curvas tensión-deformación corregidas y sin corregir de calentamiento diabático para  $\epsilon' = 2s^{-1}$  y distintas temperaturas. Aleación AZ61.

*Figure 4. Stress-Strain curves, corrected and without correction of adiabatic heating for  $\epsilon' = 2s^{-1}$  and different temperatures. AZ61 alloy.*



**Figura 5.** Velocidad de deformación frente a la tensión a diferentes temperaturas para la aleación de magnesio AZ80 y deformación 0,4.

*Figure 5. Strain rate versus stress at various temperatures for the magnesium alloy AZ80 at 0.4, strain.*



**Figura 6.** Evolución de los parámetros de la ecuación constitutiva de Garofalo con la deformación para la aleación de magnesio AZ80, usando el algoritmo de Newton de segundo orden.

*Figure 6. Evolution of the parameters of Garofalo constitutive equation with strain for the magnesium alloy AZ80, using the second order Newton.*

que se obtiene en el óptimo del ajuste, llegando hasta la cuarta cifra decimal. Esto es debido a la adecuación de los datos, al bajo error experimental y a la posible presencia y detección de un óptimo global.

Una vez obtenidos los parámetros en función de la deformación, es posible restituir con precisión las curvas  $\sigma$  vs  $\epsilon$  para una  $T, \dot{\epsilon}$  dada, como se ha mostrado recientemente en un artículo de este grupo de investigación<sup>[15]</sup>, de modo que partiendo de la ecuación (2) se puede despejar  $\sigma$ , obteniéndose:

$$\sigma(\epsilon) = \frac{\ln(Z^*(\dot{\epsilon}, T, \epsilon) + \sqrt{(Z^*(\dot{\epsilon}, T, \epsilon))^2 + 1}}{\alpha(\epsilon)} \tag{16}$$

donde la función  $Z^*$  tiene la forma:

$$Z^*(\dot{\epsilon}, T, \epsilon) = \left( \frac{Q(\epsilon)}{\dot{\epsilon} \cdot \epsilon^{\frac{Q(\epsilon)}{R \cdot T}}}{A(\epsilon)} \right)^{\frac{1}{n(\epsilon)}} \tag{17}$$

habiéndose utilizado la expresión clásica:

**Tabla IV.** Intervalos de confianza de los parámetros A, Q, n y  $\alpha$  correspondientes a la ecuación (2) y para la aleación de magnesio AZ80

*Table IV. Confidence intervals of the parameters A, Q, n and  $\alpha$ , of equation (2) for the magnesium alloy AZ80*

$\epsilon$	(ln A)max	(ln A) min	(ln(A))	Q(max)	Q(min)	Q	$\alpha$ (max)	$\alpha$ (min)	$\alpha$	n(max)	n(min)	n
0,1	40,48489	40,48489	40,48489	216,88907	216,88905	216,88906	15,00000	15,00000	15,00000	7,11450	7,11450	7,11450
0,2	36,09159	36,09159	36,09159	194,52437	194,52434	194,52435	13,00000	13,00000	13,00000	5,58200	5,58200	5,58200
0,3	29,46907	29,46907	29,46907	153,98669	153,98667	153,98668	10,66700	10,66700	10,66700	4,17300	4,17300	4,17300
0,4	25,47824	25,47824	25,47824	128,99038	128,99037	128,99037	9,33300	9,33300	9,33300	3,47165	3,47165	3,47165
0,5	23,82020	23,82020	23,82020	111,33112	111,33111	111,33112	6,66700	6,66700	6,66700	3,27790	3,27790	3,27790
0,6	32,62125	32,62083	32,62104	94,93075	94,93075	94,93075	0,20999	0,20997	0,20998	3,22000	3,22000	3,22000

$$\sinh^{-1}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 + 1}) \quad (18)$$

La ecuación (16) permite predecir la curva tensión-deformación cuando se conoce  $T$  y  $\dot{\epsilon}$ . Para ello se utilizan los valores de  $A(\epsilon)$ ,  $Q(\epsilon)$ ,  $n(\epsilon)$  y  $\alpha(\epsilon)$  según la tabla V. En la figura 7 se pueden observar los resultados de esta modelización, la cual corresponde al algoritmo Newton (RGCR) aplicado a la aleación de magnesio AZ80. La calidad predictiva de la modelización es alta, lo cual era de esperar ya que los intervalos de confianza son pequeños y el acondicionamiento de los datos es muy bueno, dado que los resultados están muy bien condicionados, es decir, que la dispersión es pequeña.

El método RGCR también se ha aplicado a una aleación de magnesio AZ61. En la figura 8 se representa la velocidad de deformación frente a la tensión,

obtenida experimentalmente para la aleación de magnesio AZ61 y deformación 0,4. En dicha figura se puede observar que la precisión de las medidas, al contrario que para la aleación AZ80, no es muy buena, mostrando una fuerte dispersión en tres de las cinco temperaturas.

Se ha aplicado el método RGCR-Newton a estos ensayos para determinar los valores de los parámetros dependientes de la deformación. Los resultados se muestran en la figura 9.

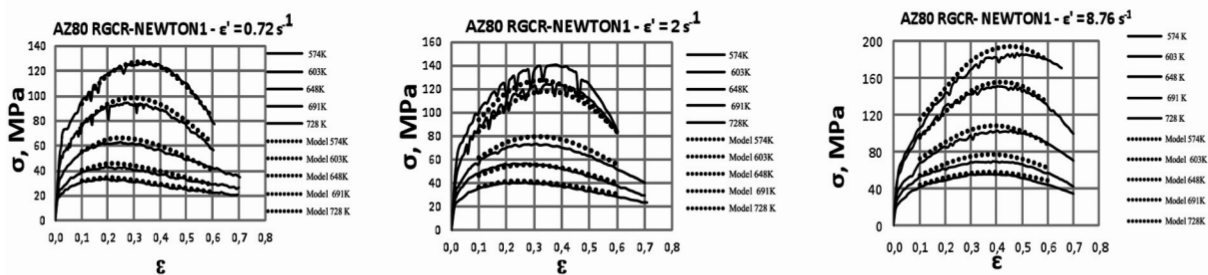
Los valores de los parámetros de la nueva ecuación constitutiva evolucionando con la deformación, para la aleación de magnesio AZ61, pueden observarse en la tabla VI.

Se observa en la tabla VI que la evolución del parámetro alfa con la deformación es muy brusca, lo cual es debido a las imprecisiones experimentales

**Tabla V.** Valores de los parámetros de la ecuación de Garofalo en función de la deformación calculados con el método RGCR-Newton para la aleación de magnesio AZ80

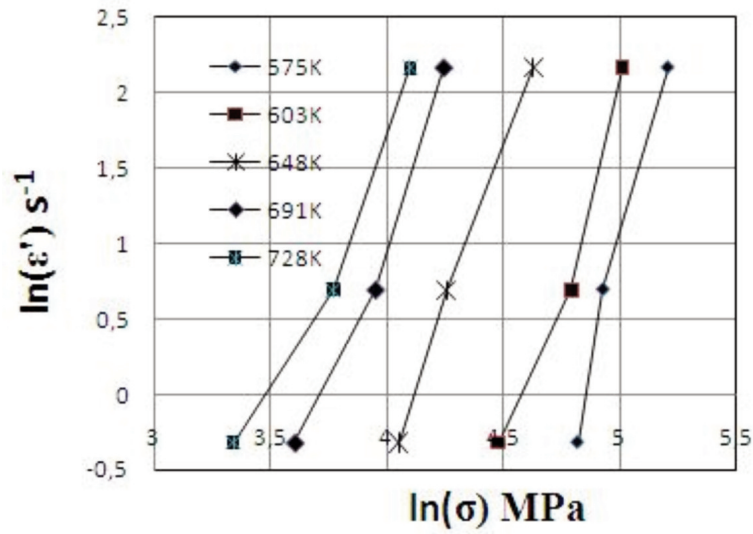
*Table V. Values of Garofalo parameters as a function of the strain calculated with the method RGCR-Newton for the magnesium alloy AZ80*

	Ln(A)	Q [kJ/mol]	n	$\alpha^*1000[\text{MPa}^{-1}]$
$\epsilon = 0,1$	40,48	216,89	7,12	15,00
$\epsilon = 0,2$	36,09	194,52	5,58	13,00
$\epsilon = 0,3$	29,47	153,99	4,17	10,67
$\epsilon = 0,4$	25,48	128,99	3,47	9,33
$\epsilon = 0,5$	23,82	111,33	3,28	6,67
$\epsilon = 0,6$	32,62	94,93	3,22	0,21



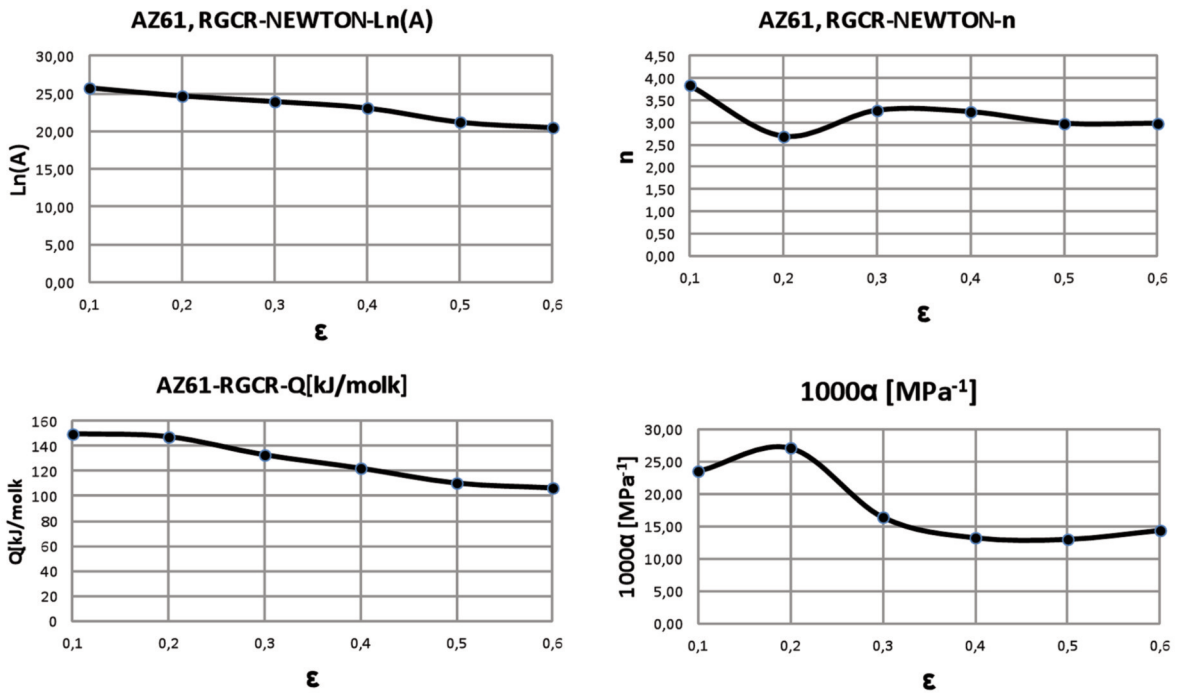
**Figura 7.** Evolución de la tensión con la deformación para datos experimentales frente a los datos predichos por la nueva ecuación constitutiva dada en su forma explícita para las tensiones en la ecuación (16) para la aleación de magnesio AZ80 a cinco temperaturas y tres velocidades de deformación.

*Figure 7. Evolution of the stress with strain for experimental data and data predicted from the new constitutive equation (16) in its explicit form for the stress, for the magnesium alloy AZ80 at five temperatures and three strain rates.*



**Figura 8.** Velocidad de deformación frente a la tensión. Ensayos experimentales para una aleación de magnesio AZ61 y deformación 0,4.

*Figure 8. Strain rate vs stress. Experimental tests for the magnesium alloy AZ61 and strain 0.4.*



**Figura 9.** Evolución de los parámetros de Garofalo con la deformación para los algoritmos usados en el estudio de la aleación de magnesio AZ61.

*Figure 9. Evolution of Garofalo parameters with strain for the algorithms used in the study of the magnesium alloy AZ61.*

**Tabla VI.** Valores de los parámetros de Garofalo con la deformación calculados con el método RGCR-Newton en el estudio de la aleación de magnesio AZ61

*Table VI. Values of Garofalo parameters with strain calculated with the RGCR-Newton method, in the study of the magnesium alloy AZ61*

$\epsilon$	$\log(A)$	$Q[\text{kJ/mol}]$	$n$	$1000\alpha [\text{MPa}^{-1}]$
0,1	25,7558	149,66	3,84	23,55
0,2	24,6961	147,33	2,69	27,14
0,3	23,9663	132,95	3,27	16,43
0,4	23,1158	122,32	3,24	13,26
0,5	21,2504	110,46	2,98	13,01
0,6	20,5280	106,56	2,98	14,39

observadas. Se entiende que el hecho de no hacer lineal el problema implica este tipo de comportamiento “poco suave”. En todos los trabajos anteriores y en los de otros autores<sup>[5-8]</sup>, se ha observado que el parámetro más sensible a inestabilidades es el parámetro alfa, con mucha diferencia respecto de los demás.

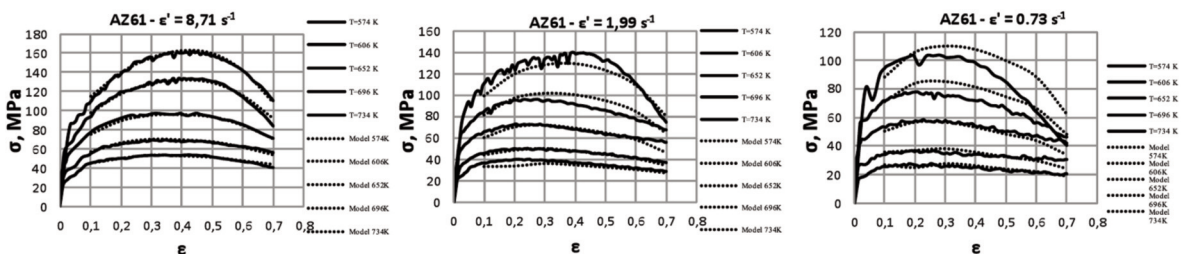
La figura 10 muestra curvas tensión-deformación reconstituidas con los valores de los parámetros de la ecuación (2) calculados con RGCR aplicado a la aleación AZ61.

Se puede observar en estas gráficas, sobre todo a baja velocidad de deformación  $\dot{\epsilon} = 0,73 \text{ s}^{-1}$  a bajas temperaturas, fuertes oscilaciones en las curvas, de mayor intensidad que en la aleación AZ80. Esto puede producir efectos severos de modificación en las curvas tensión-deformación, en la medida de tensiones, como se puede observar en las figuras 7 y 10. Estos efectos de oscilación, que provocan una dispersión intrínseca en el proceso de muestreo, ocasionan

separaciones en la medida del valor real que se tenderá a ajustar en cada máquina según la inercia de la misma y el tiempo de respuesta en el muestreo de la medida. Estas oscilaciones, por un efecto de amortiguamiento, pueden ser de hasta 15 MPa y pueden provocar errores superiores al 15% en la reproducibilidad, pese a una buena medida. En el caso de las medidas de la aleación AZ80 no aparece este efecto.

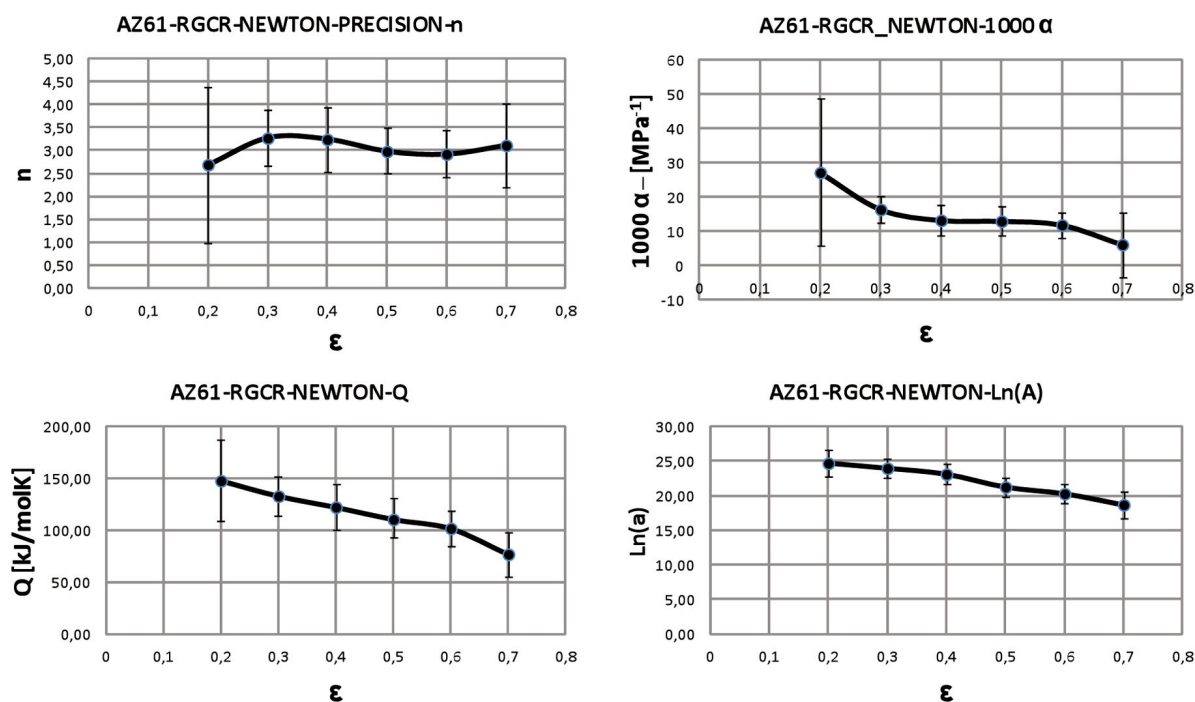
Una prueba de alta dispersión de datos en la aleación AZ61 se encuentra al calcular y representar los intervalos de confianza que, a diferencia de los insignificantes valores en la aleación AZ80, aquí sí pueden llegar a ser muy importantes e indicadores de la capacidad de adecuación de la ecuación constitutiva. La figura 11 muestra los intervalos de confianza en dicha aleación.

Hay que resaltar que cuando los ensayos están mal condicionados o las características del material le alejan, en el proceso de fluencia, de una ecuación idónea, los métodos que usan transformaciones logarítmicas,



**Figura 10.** Evolución de la tensión con la deformación para datos experimentales y predichos por la nueva ecuación constitutiva para la aleación de magnesio AZ61 a cinco temperaturas y tres velocidades de deformación.

*Figure 10. Evolution of the stress with strain for experimental data and those predicted with the new constitutive equation for the magnesium alloy AZ61 at five temperatures and three strain rates.*



**Figura 11.** Intervalos de confianza para los parámetros  $Q$ ,  $n$ ,  $Ln(A)$  y  $\alpha$ , usados en el estudio de la aleación de magnesio AZ61.

*Figura 11. Confidence intervals for the parameters  $Q$ ,  $n$ ,  $Ln(A)$  and  $\alpha$ , used in the study of the magnesium alloy AZ61.*

promedian los errores y se suaviza la función objetivo, pese a correr el riesgo de que por ello se pierda un candidato a óptimo mejor, en el sentido numérico, o más reales, en el sentido físico. Ello hace que a bajas velocidades de deformación, cuando los ensayos tienen una gran dispersión, el método RCR reproduce las curvas  $\sigma$ - $\epsilon$  con menor error relativo. No obstante, hay que señalar que el error relativo de las quince curvas por el método RGCR-Newton, a pesar de los malos ajustes a bajas velocidades de deformación, es del 6,54%. Se puede deducir que donde los datos están bien condicionados el método de Newton obtiene un promedio bajo de errores relativos.

La comparación de los errores medios de los ajustes de las curvas tensión-deformación experimentales de la aleación de magnesio AZ61, frente a los resultados de los modelos teóricos obtenidos por los métodos RGCR-Newton y RCR, aportan los resultados que se recogen en la tabla VII.

La información es muy ilustrativa de las capacidades de los métodos nuevos propuestos. El método RGCR-Newton, mejora en cuanto a la capacidad de modelización al método RCR. La mejora es del orden del 6%. No es una cantidad muy alta, pero dadas las características que vamos a analizar la mejora es significativa.

Se puede observar que ocho de las quince curvas, resultado de combinar las tres velocidades de deformación y las cinco temperaturas, son mejor reproducidas por el método RGCR-Newton, que por el RCR. Por otra parte, se observa algo muy significativo. El coeficiente de Variación de Pearson indica que el método RGCR-Newton, siendo más preciso, es menos exacto, por ser más sensible a las fluctuaciones o a los errores en las medidas que RCR. El método RCR, en su primera etapa, trabaja con funciones aproximadas logarítmicamente. Esto facilita la compensación de errores ya que de alguna manera la función logaritmo es un suavizador de los errores. El método de RGCR-Newton, por el contrario, en ninguna parte de su estructura algorítmica usa aproximaciones logarítmicas (en el formato que hemos implementado en este trabajo), y es por ello, y por tratarse de un método aproximativo de segundo orden, que los términos correctores de segundo orden son muy dependientes (Ec. (9)) del buen o mal condicionamiento de los datos. Esto es, errores numéricos de medida irreducibles hacen que el modelo esté afectado por los mismos en mayor intensidad que en el método ya clásico RCR. No obstante, la precisión del método es más alta, y su capacidad de encontrar "mínimos locales" próximos, con alta sensibilidad,

**Tabla VII.** Errores relativos de los ajustes de las curvas tensión-deformación del modelo RGCR-Newton frente a los errores relativos del modelo RCR, en ambos casos para todas las curvas de los ensayos de la aleación de magnesio AZ61

*Table VII. Relative errors for the fit of stress-strain curves of the model RGCR-Newton compared to the relative errors of the model RCR, in both cases for all the curves of the experimental tests of the magnesium alloy AZ61*

<b>Comparación de los errores relativos para los métodos RGCR-Newton y RCR</b>			
$\epsilon'$ [s <sup>-1</sup> ]	T [K]	RCR	RGCR-Newton
8,71	734	11,22	6,68
1,99	734	3,73	3,79
0,73	734	6,8	4,91
8,71	696	8,36	5,06
1,99	696	2,14	2,51
0,73	696	8,98	9,12
8,71	652	4,66	2,79
1,99	652	4,37	3,64
0,73	652	9,14	5,98
8,71	606	7,61	7,14
1,99	606	5,43	6,39
0,73	606	6,37	9,92
8,71	574	8,74	7,38
1,99	574	5,06	5,83
0,73	574	6,8	12,49
DESVIACIÓN MEDIA DE ERRORES			6,6
DESVIACIÓN TÍPICA			2,47
CV-PEARSON			0,37

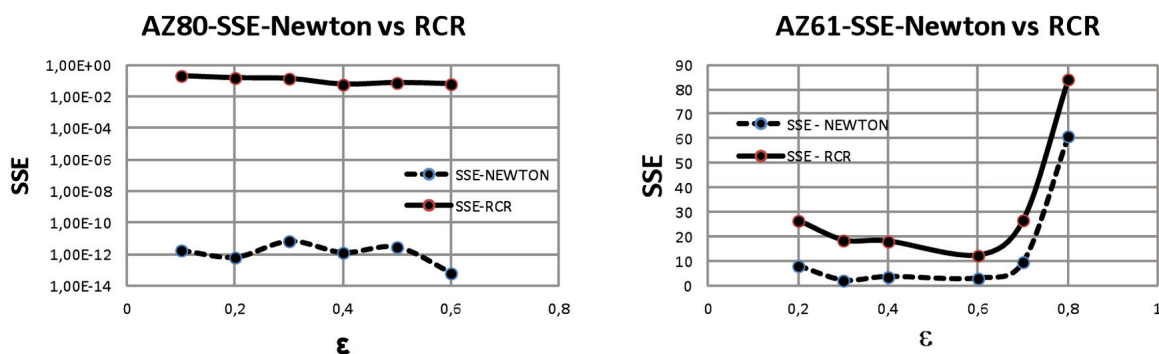
es mucho mayor por su dependencia del Hessiano, no solo del gradiente, como es el caso del RCR. Así pues, el método RGCR-Newton, puede encontrar mínimos locales, posiblemente mínimos globales, en función del tamaño de paso de las mallas, de mayor profundidad que el método RCR.

Dado que el método de obtención de  $\{A, Q, n, \alpha\}$  en RGCR-Newton es un método global, cuando se aplica a los distintos valores de  $\epsilon$ , para obtener  $\{A(\epsilon), Q(\epsilon), n(\epsilon), \alpha(\epsilon)\}$ , puede ser más preciso en sus resultados, pero en algunos casos más alejado de la realidad física que en otros que provienen de un promedio. La mayor precisión se debe traducir, como así es, en un mejor ajuste promedio. No obstante, el método RGCR-Newton mostrará en las curvas cuya medida esté más afectada del error, un mayor

error para la reproducibilidad de la curva experimental. Por tanto, en promedio el método de segundo orden, RGCR-Newton, aportará mejores resultados, pero también se mostrará más sensible al error. Esto se podrá mejorar aplicando el método RGCR-Newton a modelos pseudo linealizados. Dicho de otra forma, el método también detecta la adecuación de los datos al modelo, bien porque el modelo subyacente de la fluencia sea más complejo que la mera ecuación de Garofalo, o bien porque, aunque ésta sea adecuada como función objetivo, el procedimiento experimental tenga un error intrínseco muy alto.

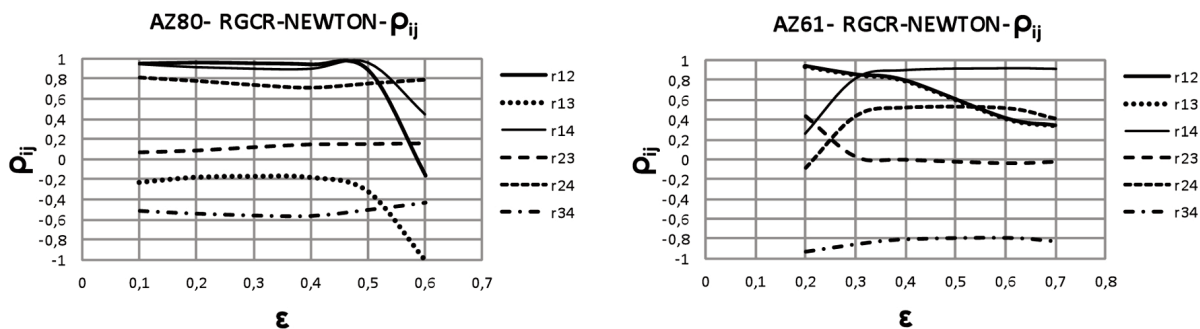
En la figura 12 se comparan las funciones cuadráticas de error para RCR y Newton en las aleaciones de magnesio, AZ80 y AZ61. Se observa que la fun-





**Figura 12.** Comparación de funciones cuadráticas de error para los métodos RCR y Newton para las aleaciones de magnesio AZ80 y AZ61.

*Figure 12. Comparison of quadratic error functions for RCR and Newton methods for the magnesium alloys AZ80 and AZ61.*



**Figura 13.** Coeficientes de correlación entre los parámetros del modelo RGCR-Newton para ambas aleaciones AZ80 y AZ61.

*Figure 13. Correlation coefficients among the parameters of the RGCR-Newton model for both magnesium alloys AZ80 and AZ61.*

ción cuadrática de error SSE es menor en el método RGCR-Newton que en el RCR-Gauss-Newton para las dos aleaciones estudiadas. La figura pone de manifiesto que cuando la calidad de los datos es muy alta, como en el caso de la aleación AZ80, la función de error presenta unos valores que van desde el orden  $10^{-1}$  para el RCR hasta valores del orden de  $10^{-12}$  e incluso  $10^{-17}$  para RGCR-Newton.

En la figura 13, se pueden observar los coeficientes de correlación entre los parámetros del modelo, para ambas aleaciones. Es destacable que para la aleación AZ80, únicamente los coeficientes de correlación  $r(1,2)$  y  $r(1,4)$ , esto es, los que miden la correlación entre  $A$  y  $Q$ , en un caso y entre  $A$  y  $n$  en el otro, presentan valores con intensidad suficiente como para poder sostener que existe, probablemente, o bien una dependencia mutua de las variables de conformado,  $T$ ,  $\sigma$ , y  $\epsilon'$  o bien una rela-

ción del tipo  $A = kQ$  o  $A = kn$ . Sin embargo, en el caso de la aleación AZ61, es únicamente la correlación  $r(1,4)$ , la relación entre los parámetros  $A$  y  $n$ , la que manifiesta una intensidad significativa, aunque en un sentido inverso también se debería considerar la relación entre  $\alpha$  y  $n$ .

## 5. CONCLUSIONES

— Analizados los resultados en las aleaciones de magnesio AZ61 y AZ80, es evidente que el método de segundo orden de RGCR-Newton para la optimización aporta mucha información adicional y significativa. Por una parte los algoritmos desarrollados con el nuevo método presentan los efectos de la modelización con claridad, una mayor exactitud, medida a partir del

error relativo, del ajuste de cada curva tensión-deformación, así como el promedio de todas. Este método como potencial modelizador de las curvas tensión-deformación es superior al método RCR. Por otra parte, la precisión del nuevo método mejora la del método RCR, solo en algunos casos. En el caso de que los datos estén bien condicionados, y los errores de medida estén minimizados, la precisión del método RGCR-Newton, valorada a partir de los intervalos de confianza de los parámetros del modelo, es mayor que la del método RCR. Cuando los errores de medida, por las características de los procesos de fluencia plástica de un determinado material, como es el caso del AZ61, sean altos, aunque la precisión sea buena, puede, en los casos de las curvas afectadas por el error, ser peor que el del modelo RCR, aunque en promedio sea mejor. El caso de estas curvas, que introducen un error específico, debería ser tratado con un método de segundo orden pero con cambios de variables logarítmicas, con lo cual se tendrían elementos positivos del método RCR como suavizador de errores locales, con el potencial del método de segundo orden de Newton.

- La capacidad de detalle y de análisis que nos ha permitido el estudio estadístico a partir de la matriz de varianzas-covarianzas, obtenida a partir de desarrollos con el Hessiano, aporta información significativa. Por una parte el error cuadrático medio de los procesos de modelización es significativamente menor en el caso del modelo RGCR, que en el RCR. Por otra parte hemos podido detectar correlaciones significativas, entre los parámetros de la ecuación constitutiva a partir del modelo de Garofalo, lo que puede indicar un estado de sobreparametrización del modelo o bien de una dependencia de los parámetros correlacionados respecto de una o unas mismas variables del conformado.
- El método supone un avance en exactitud, precisión y capacidad de análisis en la modelización de los procesos de la fluencia plástica de materiales metálicos.

## Agradecimientos

Los autores agradecen al CICYT la financiación de esta investigación a través de los proyectos MAT 2009-14385 y MAT2012-38962.

## REFERENCIAS

- [1] I. Rieiro, J. Castellanos, J. Muñoz, V. Gutierrez, M. Carsí y O.A. Ruano, *Proc. X Congreso Nacional de Materiales*, Vol I, San Sebastián, España, 2008, pp. 317-322.
- [2] C. Sotin y J. Poirier, *Mech. Mater.* 3 (1984) 311-317.
- [3] J.P. Poirier, C. Sotin y S. Beauchesne. *Deformation Processes in Minerals, Ceramics and Rocks*, D.J. Barber y P.G. Meredith, Ed. Unwin Hyman, London, England, 1990.
- [4] F. Garofalo, *Fundamentals of Creep and Creep Rupture in Metals*, Ed. McMillan Series in Materials Science, New York, EE.UU., 1965.
- [5] H.J. McQueen y N.D. Ryan, *Mater. Sci. Eng. A* 322 (2002) 43-63.
- [6] H.J. McQueen, Y. Li, I. Rieiro, M. Carsí y O.A. Ruano, *Thermomechanical Processing of Steels, 3rd International Conference*, Padua, Italia, 2008.
- [7] A. Cingara y H.J. McQueen, *J. Mater. Process. Tech.* 36 (1992) 3.142.
- [8] I. Rieiro, M. Carsí y O.A. Ruano, *Mater. Sci. Tech.* 25 (2009) 995-1.002.
- [9] M. Zhou y M.P. Clode, *Mech. Mater.* 27 (1998) 63-76.
- [10] M. Mulyadi, M.A. Rist, L. Edwards y J.W. Brooks, *J. Mater. Process. Tech.* 177 (2006) 311-314.
- [11] Y.C. Lin, M.S. Chen y J. Zhang, *Mater. Sci. Eng. A* 499 (2009) 88-92.
- [12] T.C.T. Ting y S.C. Chou, *Mech. Mater.* 31 (1999) 289-293.
- [13] L. Jiao, L. Miaoquan, L. Xiaoli y S. Yanpei, *Mech. Mater.* 42 (2010) 157-165.
- [14] I. Rieiro, V. Gutiérrez, J. Castellanos, M. Carsí, M.T. Larrea y O.A. Ruano, *Metal. Mater. Trans. A* 41 (2010) 2.396- 2.407.
- [15] H.J. McQueen, L. Yong, I. Rieiro, M. Carsí y O.A. Ruano, *TMS (The Minerals, Metals, & Materials Society) Supplemental Proceeding*, Vol. 2, California, EE. UU., 2011.
- [16] I. Rieiro, J. Castellanos, M. Carsí, J. Muñoz y O.A. Ruano, *Mater. Sci. Forum* 604-605 (2009) 87-96.
- [17] I. Rieiro, J. Castellanos, J. Muñoz, M.T. Larrea, V. Amigo y O.A. Ruano, *Proc. Tratermat*, Valencia, España, 2008.
- [18] I. Rieiro, J. Castellanos, M. Carsí, D. Martín, M.T. Larrea y O.A. Ruano, *Rev. Latinoam. Metal. Mater.* 2 (2009) 725-734.
- [19] K. Schittkowski, *Numerical data fitting in dynamical systems*, Kluwer Academia Publishers, London, England, 2002, pp. 115-118.

- [20] A. Neumaier, O. Shcherbina, W. Huyer y T. Vinkó, *Math. Program.* 103 (2005) 335-356.
- [21] N. Hansen y A. Ostermeier, *Evolutionary Computation* 2 (2001) 159-195.
- [22] R. Fletcher, *Practical methods of optimization*, Ed. J. Wiley & Sons, New York, EE.UU., 1987.
- [23] P.N. Suganthan, N. Hansen, J.J. Liang, K. Deb, Y.P. Chen, A. Auger y S. Tiwari, *CEC 2005*, Technical Report Number 2005005, Nanyang Technological University, Singapore and KanGAL IIT Kanpur, India, 2005.
- [24] I. Rieiro, Tesis Doctoral, Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España, 1997.
- [25] I. Rieiro, M. Carsí y O.A. Ruano, *Mater. Sci. Tech.* 25 (2009) 995-1.002.
- [26] J. Nocedal y S.J. Wright, *Numerical Optimization*, Ed. Springer Verlag, New York, EE.UU., 1999, pp. 270-302.
- [27] N.P. Archer, W.V. Prestwich y G.L. Keech, *Nuclear Instruments and Methods* 44 (1966) 114-118.
- [28] A.R. Gallant, *Univariate nonlinear regression, Nonlinear Statistical Models*, Ed. John Wiley & Sons, New York, EE.UU., 1986.
- [29] B.T. Polyak, *Europ. J. Operational Res.* 181 (2007) 1.086-1.096.
- [30] V. Gutiérrez, TIT, Universidad de Castilla La Mancha, España, 2009.
- [31] C.T. Kelley, *SIAM (Society for Industrial and Applied Mathematics) Conference*, Philadelphia, EE.UU., 1999.
- [32] J. Castellanos, I. Rieiro, M. Carsí, J. Muñoz y O.A. Ruano, *J. Achievements Mater. Manufacturing Eng.* 18 (2006) 447-454.
- [33] J. Castellanos, I. Rieiro, J. Muñoz, M. Carsí y O.A. Ruano, *Proc. IX Congreso Nacional de Materiales*, Vigo, España, 2006, pp. 211-214.
- [34] J. Castellanos, I. Rieiro, M. El Mehtedi, M. Carsí y O.A. Ruano, *Int. J. Mater. Res.* 101 (2010) 787-793.
- [35] I. Rieiro, J. Castellanos, J. Muñoz, M.T. Larrea, V. Amigo y O.A. Ruano, *Proc. Tratermat*, Valencia, España, 2008.
- [36] M.T. Larrea, D. Martín, V. Amigó, X. Toneu y O.A. Ruano, *Proc. X Congreso Nacional de Materiales*, San Sebastián, España, 2008, pp. 273-276.