

# Estimación de propiedades térmicas de aleaciones como problema inverso<sup>(\*)</sup>

J. Zueco\* y F. Alhama\*\*

## Resumen

Se presenta un método numérico eficaz para la estimación de las dependencias térmicas (conductividad y capacidad calorífica) de aleaciones, a partir de medidas de temperatura (incluyendo el error), en procesos de calentamiento y/o enfriamiento. El protocolo propuesto combina una modificación de la clásica técnica de estimación de funciones, característica del problema inverso, con el método de simulación por redes como técnica de cálculo propiamente numérica ya probada para la solución de numerosos problemas no lineales. Las estimaciones sólo requieren un punto de medida. Se aplica esta metodología para obtener estimaciones en rangos de temperatura en los que producen transformaciones alotrópicas, caracterizadas por una dependencia muy acusada de estas propiedades con la temperatura.

## Palabras clave

Propiedades térmicas. Aleaciones. Problema inverso. Estimación de funciones. Método de redes.

## Estimation of the thermal properties in alloys as an inverse problem

## Abstract

This paper provides an efficient numerical method for estimating the thermal conductivity and heat capacity of alloys, as a function of the temperature, starting from temperature measurements (including errors) in heating and cooling processes. The proposed procedure is a modification of the known function estimation technique, typical of the inverse problem field, in conjunction with the network simulation method (already checked in many non-linear problems) as the numerical tool. Estimations only require a point of measurement. The methodology is applied for determining these thermal properties in alloys within ranges of temperature where allotropic changes take place. These changes are characterized by sharp temperature dependencies.

## Keywords

Thermal properties. Alloys. Inverse problem. Function estimation. Network method.

## 1. INTRODUCCIÓN

El conocimiento de las propiedades térmicas de aleaciones es fundamental en numerosas aplicaciones industriales: uso de estos materiales en bajas y altas temperaturas, problemas de tratamientos térmicos y termoquímicos, choque térmico, etc. Las propiedades térmicas, conductividad y capacidad calorífica (o calor específico) son, en general, dependientes de la temperatura y esta dependencia es, particularmente, acusada si en el rango de temperaturas de trabajo tienen lugar transformaciones

de tipo alotrópico o se produce cambio de fase en el material<sup>[1 y 2]</sup>.

La determinación experimental de la conductividad y la capacidad calorífica suele realizarse por métodos que requieren equipos costosos y no siempre disponibles para los investigadores. Además, si estas propiedades deben estimarse para un elevado rango de temperaturas, el tiempo invertido en estas estimaciones puede ser considerable. Trabajos realizados en este campo son los de Huang y Özisik<sup>[3]</sup> y Huang y Yan<sup>[4]</sup>, que obtuvieron por integración directa estimaciones de estas propiedades para

(\*) Trabajo recibido el día 21 de octubre de 2004 y aceptado en su forma final el día 5 de febrero de 2005.

(\*) Universidad Politécnica de Cartagena (UPCT). Dpto. de Ingeniería Térmica y de Fluidos. Campus Muralla del Mar. 30202 Cartagena.

(\*\*) UPCT. Dpto. de Física Aplicada. Campus Muralla del Mar. 30202 Cartagena.

dependencias de tipo lineal y sinusoidal en medios 1-D. También, Sawaf y col.<sup>[5]</sup>, por medio del método de Levenberg-Marquardt obtuvieron estimaciones para medios 2-D ortotrópicos, y Yang<sup>[6]</sup> obtuvo estimaciones muy precisas de la conductividad térmica para dependencias lineales, exponenciales y sinusoidales y del calor específico para dependencias lineales.

En el presente trabajo se propone un método preciso y eficaz para la determinación de las características térmicas dependientes, acusadamente, de la temperatura a partir de un sencillo experimento de enfriamiento o calentamiento que proporcione un conjunto de temperaturas (medidas) que se usan como datos de partida para el problema inverso. Para ello, se parte de un modelo en red basado en el Método de Simulación por Redes<sup>[7]</sup> y un protocolo de estimación de estas propiedades basado en una modificación mejorada de la técnica de estimación de funciones<sup>[8 y 9]</sup>. A diferencia de esta técnica clásica, en la que la estimación está formada por una función discontinua formada por tramos horizontales del mismo tamaño, la modificación propuesta adopta segmentos inclinados, de pendiente y tamaño variable, para reconstruir la función (continua) lineal a tramos que proporciona la estimación. Este cambio supone una sensible mejora en la estimación resultante y permite que la convergencia de la solución se consiga con menores pasos de cálculo. Las medidas de temperatura se obtienen, como es habitual en este tipo de trabajos<sup>[10]</sup>, a partir de la simulación numérica del problema directo, cuyos resultados se alteran por aplicación de un cierto error aleatorio. El problema directo se resuelve numéricamente mediante el método de simulación por redes. Mediante la ejecución iterativa de un programa en Visual C++, que ejecuta el modelo y compara las estimaciones con las medidas hasta que se satisface un criterio de convergencia asociado con el valor del funcional típico de esta clase de problemas. Los modelos en red, tanto del problema directo<sup>[11]</sup> como del inverso, son prácticamente idénticos y su simulación se lleva a cabo en un programa adecuado de simulación de circuitos<sup>[12]</sup>.

Se presentan aplicaciones a aleaciones reales para tipos de dependencias muy acusadas tanto de la conductividad térmica como de la capacidad calorífica.

## 2. NOMENCLATURA

$c_e$  calor específico ( $J\ kg^{-1}\ K^{-1}$ )  
 $C$  capacidad calorífica ( $J\ m^{-3}\ K^{-1}$ )

$C$  condensador y capacitancia (F), figura 1  
 $F$  funcional definido en ecuación (7)  
 $G$  fuente de corriente controlada por voltaje, figura 1  
 $h$  coeficiente de transferencia de calor ( $Wm^{-2}\ K^{-1}$ )  
 $k$  conductividad térmica ( $Wm^{-1}\ K^{-1}$ )  
 $L$  espesor de la muestra (m)  
 $m, n$  números enteros  
 $t$  tiempo (s)  
 $T$  temperatura (K)  
 $x$  coordenada espacial  
 $Z$  número total de tramos  
 $\Delta_{slope}$  incremento o decremento de la pendiente de cada  
 $\Delta x$  espesor volumen de control (m)  
 $\Delta T_a$  intervalo de temperaturas asociado al funcional (K)  
 $\Delta t$  intervalo de tiempo entre medidas

## Símbolos griegos

$\delta$  criterio de convergencia  
 $\varepsilon$  error aleatorio normal  
 $\xi$  función a estimar  
 $\sigma$  desviación estándar de los errores en las medidas de temperatura  
 $\omega$  variable número aleatorio

## Subíndices

$d$  indica la solución del problema directo  
 $f$  localización particular en la muestra  
 $i$  posición central del elemento de volumen, figura 1  
 $inv$  se refiere a la solución del problema inverso (ecuación 7)  
 $new$  indica un nuevo punto para la estimación  
 $o$  condición inicial

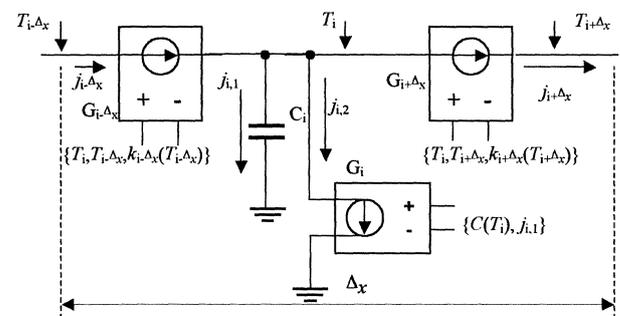


Figura 1. Nomenclatura y modelo en red de una celda elemental.

Figure 1. Nomenclature and network model of the control volume.

- p número natural (número total de medidas de temperatura)
- $\infty$  medio circundante
- $z$  1, 2, ..., Z

### 3. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

Se pretende obtener, por separado, las características térmicas, conductividad ( $k$ ) y capacidad calorífica ( $C=c_p\rho$ ), de aleaciones partiendo de la medida de temperaturas obtenida en procesos de calentamiento o enfriamiento de estos materiales. Por simplicidad se ha adoptado un medio 1-D rectangular. A fin de contrastar la eficacia del modelo, y como es habitual en este tipo de problema inverso, se parte de la solución exacta  $k(T)$  y  $C(T)$ , o bien de los datos experimentales de estas magnitudes y se resuelve el problema directo no lineal que permite obtener, numéricamente, la solución del campo de temperaturas en el medio  $T_d(x, t)$ . A partir de esta solución, se extrae un conjunto discreto de temperaturas, a intervalos regulares de tiempo, correspondiente a una posición concreta del medio,  $T_d(x_f, t_j)$ . Este conjunto es afectado de un error aleatorio (que simula las temperaturas medidas en una experiencia real),  $\epsilon_j$ , proporcionando el nuevo conjunto de datos,  $T_d(x_f, t_j)+\epsilon_j$ , que constituye el punto de partida para el problema inverso de estimación de  $k(T)$  y  $C(T)$ .

#### 3.1. Modelos matemáticos de los problemas directo e inverso

El modelo matemático del problema directo está formado por la ecuación de conducción de calor (Ec. (1)), las ecuaciones asociadas a las condiciones de contorno, adiabática en un extremo del material, (Ec. (2)), y de convección en el otro (Ec. (3)), y la condición inicial de temperatura constante del medio (Ec. (4)):

$$C(T) \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(T) \frac{\partial T}{\partial x} \right), \quad 0 < x < L \quad (1)$$

$$-k(T) \frac{\partial T}{\partial x} = 0, \quad x=0 \quad (2)$$

$$-k(T) \frac{\partial T}{\partial x} = h(T - T_\infty), \quad x=L \quad (3)$$

$$T = T_0, \quad t=0, 0 < x < L \quad (4)$$

Para la dependencia continua de las propiedades térmicas con la temperatura pueden asumirse funciones matemáticas explícitas o definidas a tramos,

en la forma  $k(T_\alpha) = k_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, m$ , y  $C(T_\alpha) = C_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, n$ ; estas últimas, son capaces de aproximar con precisión cualquier tipo de dependencia para estas propiedades, en todos los medios.

Para resolver el problema inverso es necesario realizar medidas de temperaturas en una o varias posiciones del sólido, tomadas en tiempos discretos a lo largo del proceso no estacionario. Estas medidas pueden obtenerse experimentalmente (para ello, es necesario realizar todo el montaje experimental) o, lo que es más común y evita el montaje experimental, simular el problema directo (partiendo del conocimiento exacto de las dependencias con la temperatura de las propiedades térmicas), obteniendo el campo térmico  $T_d(x_f, t_j)$  que se modifica por aplicación de un error aleatorio para simular las medidas experimentales. Estas últimas temperaturas, afectadas de error junto con las ecuaciones (1)-(4) representan el modelo matemático del problema inverso, teniendo en cuenta que: i) la dependencia desconocida de una de las propiedades térmicas se estima mediante tramos inclinados y continuos de incrementos de temperatura crecientes o decrecientes (según se trate de procesos de calentamiento o enfriamiento, respectivamente) y ii) la temperatura de referencia para la convección se limitará en cada estimación (asociada a un tramo o segmento de la función a estimar), al valor máximo (calentamiento) o mínimo (enfriamiento) del intervalo de temperaturas estimado.

#### 3.2. Modelos en red de los problemas directo e inverso

Básicamente, los modelos en red del medio son idénticos para los dos problemas ya que se deducen de la misma ecuación diferencial, (Ec. (1)). La diferencia reside en el funcionamiento de los dispositivos que lo integran. La discretización espacial de la ecuación (1) conduce a la ecuación diferencial en diferencias finitas

$$C_i (dT_i/dt) = \{ [k_{i-\Delta} (T_{i-\Delta} - T_i) / (\Delta x / 2)] - [k_{i+\Delta} (T_i - T_{i+\Delta}) / (\Delta x / 2)] \} / \Delta x \quad (5)$$

donde, de acuerdo con las expresiones para las dependencias térmicas de  $C$  y  $k$ , la capacidad calorífica se evalúa a la temperatura del centro de la celda,  $C_i = C(T_i)$ , y las conductividades en los extremos,  $k_{i-\Delta} = k(T_{i-\Delta})$  y  $k_{i+\Delta} = k(T_{i+\Delta})$ . Véase la nomenclatura en la figura 1.

Cada sumando de la ecuación (6) se implementa en el modelo mediante un generador de corriente

controlado cuya salida se especifica mediante software<sup>[7]</sup>; una pequeña manipulación de la ecuación anterior, consistente en separar en dos sumandos, uno de ellos constante, el valor de  $C(T_i)$ , permite integrar un condensador en el modelo sobre el que se fija la condición de temperatura inicial<sup>[11]</sup> (Fig. 1).

Para el problema directo, basta añadir al modelo las condiciones de contorno mediante una resistencia de valor infinito para la condición adiabática y un generador de corriente controlado para la condición convectiva<sup>[7]</sup>.

Para el problema inverso se ensayan sucesivas dependencias de la propiedad buscada con la temperatura, para el intervalo de temperaturas de ensayo, hasta optimizar la estimación parcial asociada con el mínimo valor del funcional definido a tal fin. Este funcional relaciona las temperaturas  $T(x_f, t_j, \varepsilon_j)$  y las proporcionadas por el modelo. Los ensayos se realizan especificando, mediante software, estas dependencias en los correspondientes generadores de corriente controlados relacionados con esta propiedad. Por su simplicidad, estos dispositivos (circuitos auxiliares al modelo en red<sup>[7]</sup>), no se han incluido en la figura 1.

#### 4. PROCEDIMIENTO DE ESTIMACIÓN SECUENCIAL

A partir del conjunto de temperaturas de la solución del problema directo,  $T_d(x_f, t_j)$ , donde  $t_j = t_1, t_2, \dots, t_p$  es una serie de  $p$  instantes dentro del periodo transitorio,  $\Delta t$  es el tiempo entre medidas y  $x_f$  la posición en la que se toma la medida, se elabora una nueva serie,  $T(x_f, t_j, \varepsilon_j)$ , modificando la anterior con un error normal aleatorio  $\varepsilon_j = \omega_j \sigma$ ,  $\omega_j$  de valor medio cero, desviación standard unidad y un 99 % de intervalo de confianza. El valor de  $\omega_j$ , contenido dentro del rango  $-2.576 < \omega_j < 2.576$ , lo proporciona un generador de números aleatorios. La posición del punto de medida es la superficie convectiva del medio.

$$T(x_f, t_j, \varepsilon_j) = T_d(x_f, t_j) + \varepsilon_j \quad (6)$$

Cada tramo de la función estimada se asocia a un intervalo de temperatura,  $\Delta T_a$ , de forma que, en el proceso de estimación del mencionado tramo, las condiciones de contorno deben impedir que el medio rebase ese intervalo de temperaturas. Una rutina de programa permite cambiar, paso a paso, la pendiente de este tramo y evaluar el funcional que compara las temperaturas proporcionadas

por la solución parcial estimada con las exactas. Un criterio de convergencia repite la estimación para sucesivas pendientes hasta obtener el tramo óptimo.

El funcional que se estima en cada iteración tiene la forma clásica:

$$F[\xi, x_f, \Delta_{\text{slope}}, \Delta T_a, \Delta t, \varepsilon, z] = \sum [T_{\text{inv}}(\xi, x_f, t_j, \Delta_{\text{slope}}) - T(x_f, t_j, \varepsilon_j)]^2 \quad (7)$$

donde,  $\xi$  es la propiedad estimada ( $k$  o  $C$ ),  $z = 1, 2, \dots, Z$ , identifica el tramo estimado, y  $\Delta_{\text{slope}}$  es el valor incremental de la pendiente.  $T_{\text{inv}}(\xi, x_f, t_j, \Delta_{\text{slope}})$  son los valores estimados para la posición  $x_f$  y el tiempo  $t_j$ .

El procedimiento de estimación se resume en los siguientes pasos que se ejecutan en una rutina programada en visual C++<sup>[13]</sup>:

- (i) Obtención de las temperaturas  $T_d(x_f, t_j)$ , mediante el método de redes, y de  $T(x_f, t_j, \varepsilon_j)$ , a partir del generador de números aleatorios.
- (ii) Obtener el punto inicial de la estimación de  $\xi(T)$ . Para ello, se usan tramos horizontales (x).
- (iii) Definir  $\Delta T_a$ ,  $\Delta_{\text{slope}}$  y  $\delta$  (criterio de convergencia).
- (iv) Estimación del primero o sucesivos tramos.
- (v) Ejecutar el modelo inverso y determinar  $F_{(z)}$ .
- (vi) Incrementar positiva y negativamente  $\Delta_{\text{slope}}$  y seleccionar la nueva pendiente que cumple  $F_{(z),\text{new}} < F_{(z)}$ . Sustituir  $F_{(z)}$  por  $F_{(z),\text{new}}$ .
- (vii) Si  $\Delta_{\text{slope}} > \delta$ , repetir (vi).
- (viii) Si  $\Delta_{\text{slope}} < \delta$ , retener el tramo asociado a la pendiente final, limitado por los puntos  $T_0 + ((z-1)/2)\Delta T_a$  y  $T_0 + (z/2)\Delta T_a$ .
- (ix) Si  $z < Z$ , volver a (iv).
- (x) La estimación se ha completado.

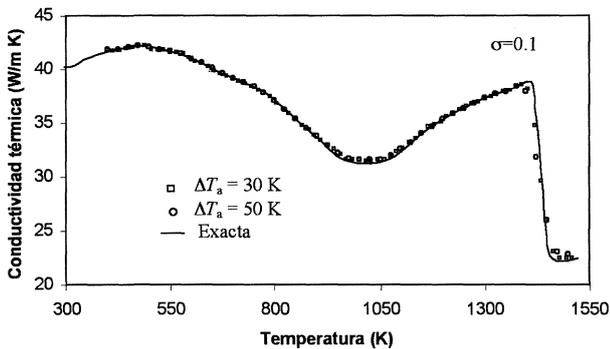
#### 5. APLICACIONES

Se han seleccionado dos materiales para este trabajo, una aleación férrea y otra no férrea. La aleación férrea es una fundición con grafito compacto o vermicular (GCI), cuya composición es: Fe-3,65 C-2,34 Si-0,55 Mn-0,01 S-0,03 P-0,61 Cu-0,48 Ni-0,14 Ti-0,08 Cr-0,02 Mg-0,01 Mo. La aleación no férrea es la aleación de aluminio-cobre para moldeo A201, de composición: Al-4,7 Cu-0,31 Mn-0,28 Mg-0,21 Ti-0,59 Ag-0,05 Fe y con un contenido en silicio inferior al 0,05 %. Los parámetros del problema son:  $L=0,02$  m;  $h=100$  W/m<sup>2</sup> K. Para el CGI,  $T_\infty=1.550$  K,  $T_0=300$  K y la temperatura de

inicio de la estimación de 400 K. Mientras, para el aluminio,  $T_{\infty}=1.000$  K,  $T_0=323$  K y la temperatura de inicio de la estimación de 323 K.

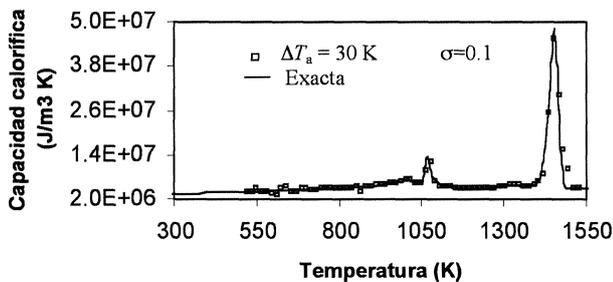
En las figuras 2-5 se muestran las diferentes estimaciones realizadas y la solución exacta, esta última en trazo continuo. La figura 2 muestra la estimación de la conductividad térmica para el CGI, para dos intervalos de estimación de temperatura 30 y 50 K y una desviación típica en las medidas de 0,1. La figura 3 muestra la estimación de la capacidad calorífica para el CGI, para un intervalo de estimación de temperatura 30 K y una desviación típica en las medidas de 0,1.

La figura 4 muestra la estimación de la conductividad térmica para la aleación de aluminio, para dos intervalos de estimación de temperatura 30 y 50 K y una desviación típica en las medidas de 0,5. Se observa, en este caso, que al aumentar el error en las medidas la estimación se hace más imprecisa. Finalmente, la figura 5 muestra la estimación de la capacidad calorífica para el aluminio para dos intervalos de estimación de temperatura 20 K y 30 K, y una desviación típica en las medidas de 0,1.



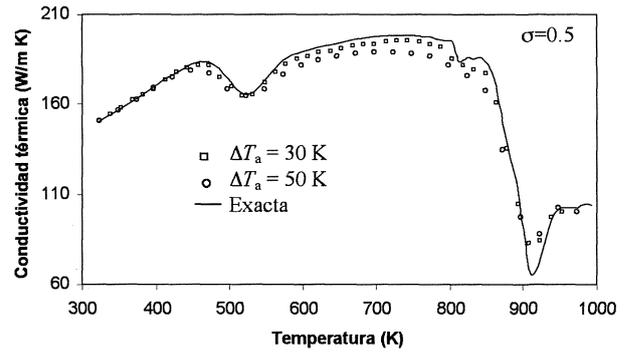
**Figura 2.** Estimación de la conductividad térmica para el CGI, con  $\Delta T_a = 30$  y  $50$  K y  $\sigma=0,1$

*Figure 2. Estimation of the thermal conductivity for CGI, with  $\Delta T_a = 30$  and  $50$  K and  $\sigma=0.1$*



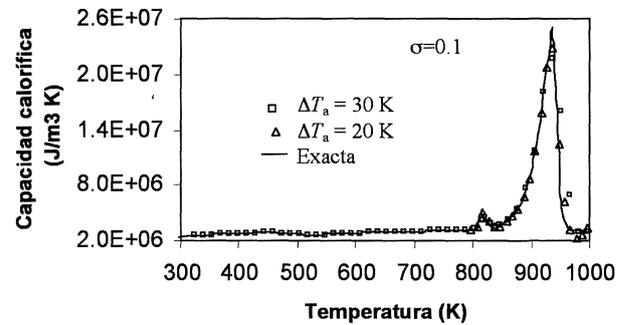
**Figura 3.** Estimación de la capacidad calorífica para el CGI, con  $\Delta T_a = 30$  K y  $\sigma=0,1$

*Figure 3. Estimation of the heat capacity for CGI, with  $\Delta T_a = 30$  K and  $\sigma=0.1$*



**Figura 4.** Estimación de la conductividad térmica para la aleación de aluminio, con  $\Delta T_a = 30$  y  $50$  K y  $\sigma=0,5$

*Figure 4. Estimation of the thermal conductivity for CGI, with  $\Delta T_a = 30$  and  $50$  K and  $\sigma=0.5$*



**Figura 5.** Estimación de la capacidad calorífica para la aleación de aluminio, con  $\Delta T_a = 20$  y  $30$  K y  $\sigma=0,1$

*Figure 5. Estimation of the heat capacity for CGI, with  $\Delta T_a = 20$  and  $30$  K and  $\sigma=0.1$*

## 6. CONCLUSIONES

A partir del modelo en red y de un protocolo de estimación desarrollado específicamente para este problema se han obtenido estimaciones de las propiedades térmicas, conductividad y capacidad calorífica, de aleaciones (CGI y Aluminio), en la forma de problema inverso de transferencia de calor. El protocolo aplicado es una modificación del clásico y conocido protocolo de Beck. Para demostrar la potencialidad del método propuesto se han elegido dependencias muy acusadas, de estas propiedades, con la temperatura, como son las que tienen lugar para rangos de temperatura en los que tienen lugar transformaciones alotrópicas.

Como único punto de medida (que supone el método experimental más simple) se ha adoptado el de mayor sensibilidad (extremo convectivo), es decir, el de mayor variación de temperatura al modificar el parámetro a estimar, no siendo necesario

realizar más medidas en puntos interiores al medio, evitando la dificultad experimental que ello representa. El tiempo de computación aumenta con el número de puntos estimados (disminución de  $\Delta T_a$  o aumento del intervalo de temperatura de la función a estimar).

Todas las estimaciones efectuadas muestran una excelente aproximación a la solución exacta, lo que indica que el método desarrollado es eficaz y adecuado para este tipo de estimaciones.

## REFERENCIAS

- [1] ASM, *ASM Handbook*, Vols. I and II., Ohio, USA, 2002.
- [2] AUBURN UNIVERSITY'S SOLIDIFICATION DESIGN CENTER, Alabama, USA, 2001, [http://metalcasting.auburn.edu/data/Ductil\\_Cast\\_Iron/Ductile.html](http://metalcasting.auburn.edu/data/Ductil_Cast_Iron/Ductile.html).
- [3] C.H. HUANG Y M.N. ÖZISIK, *Num. Heat Tran. A-Appl.* 20 (1991) 95-110.
- [4] C.H. HUANG Y J.Y. YAN, *Int. J. Heat Mass Tran.* 38 (18) (1995) 3433-3441.
- [5] B. SAWAF, M.N. ÖZISIK Y Y. JARNY, *Int. J. Heat Mass Tran.* 28 (16) (1995) 3005- 3010.
- [6] CHING-YU YANG, *Appl. Math. Model* 22 (1998) 1-9.
- [7] C.F. GONZÁLEZ-FERNÁNDEZ Y F. ALHAMA: *Heat Transfer and the Network Simulation Method. In Network Simulation Method* 35-58. Horno J. Ed. Research Signpost. Trivandrum, 2002.
- [8] J.V. BECK, B. BLACKWELL Y ST. C.R. JR. CLAIR. *Inverse heat conduction, ill-posed problems*. Wiley-Interscience, New York, 1985.
- [9] F. ALHAMA, J. ZUECO Y C.F. GONZÁLEZ-FERNÁNDEZ, *J. Heat Tran. T-ASME* 125 (6) (2003) 1.178-1.183.
- [10] T.T. LAM Y W.K. YEUNG, *J. Thermophys Heat Tran.*, 9 (2) (1995) 235-344.
- [11] F. ALHAMA, D. ALCARAZ Y C.F. GONZÁLEZ-FERNÁNDEZ, *Rev. Esp. de Met.* (en prensa).
- [12] Microsim Corporation Fairbanks, *Pspice 6.0*, Irvine, California 92718, 1994.
- [13] J. ZUECO, Tesis doctoral, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales. Universidad Politécnica de Cartagena, 2003.