



UNIVERSIDAD DE MATANZAS
Facultad de Ciencias Técnicas

Programa de Doctorado en
Tecnologías y Procesos Industriales

MODELACIÓN EMPÍRICA DE PROPIEDADES TERMOFÍSICAS DE ACEROS EMPLEADOS EN LA INDUSTRIA ENERGÉTICA

TESIS PRESENTADA EN OPCIÓN AL GRADO CIENTÍFICO
DE DOCTOR EN CIENCIAS TÉCNICAS

Autor: M.Sc. Gabriel Roque Villalonga

Matanzas, 2023



UNIVERSIDAD DE MATANZAS
Facultad de Ciencias Técnicas

Programa de Doctorado en
Tecnologías y Procesos Industriales

MODELACIÓN EMPÍRICA DE PROPIEDADES TERMOFÍSICAS DE ACEROS EMPLEADOS EN LA INDUSTRIA ENERGÉTICA

TESIS PRESENTADA EN OPCIÓN AL GRADO CIENTÍFICO
DE DOCTOR EN CIENCIAS TÉCNICAS

Autor: M.Sc. Gabriel Roque Villalonga

Tutores: Dr.C. Yanán Camaraza Medina
Dr.C. Osvaldo Fidel García Morales

Matanzas, 2023

DEDICATORIA

A mi familia, amigos, profesores, alumnos y tutores, sin ellos hubiera sido imposible realizar este trabajo.

AGRADECIMIENTOS

A mis compañeros del Departamento de Mecánica y del CEFAS de la Universidad de Matanzas, quienes fueron mis profesores y hoy son mis compañeros, especialmente a mis tutores, Dr. C Yanán Camaraza Medina y Dr. C Osvaldo F García Morales.

DECLARACIÓN DE AUTORIDAD Y NOTA LEGAL

Yo, Gabriel Roque Villalonga, declaro que soy el único autor de la siguiente tesis, titulada “*Modelación empírica de propiedades termofísicas de aceros empleados en la industria energética*” y, en virtud de tal, cedo el derecho de copia de la misma a la Universidad de Matanzas, bajo la licencia *Creative Commons* de tipo *Reconocimiento No Comercial Sin Obra Derivada*, con lo cual se permite su copia y distribución por cualquier medio siempre que mantenga el reconocimiento de sus autores, no haga uso comercial de la obra y no realice ninguna modificación de ella.

Matanzas, 13 de noviembre de 2023.

Gabriel Roque Villalonga

RESUMEN

Las propiedades termofísicas del acero son de obligatorio dominio en la ingeniería para la construcción de equipos en la industria energética. La relación de la composición química y la temperatura de trabajo del material no presentan relación lineal con la conductividad térmica, el calor específico, la densidad o la difusividad, por lo que se proponen modelos empíricos para la predicción de dichas propiedades. Se emplean los métodos de ajuste progresivo de funciones, K-vecino más cercano y redes neuronales artificiales del tipo perceptrón multicapa con una sola capa oculta, en los dos últimos casos es aplicada la optimización de hiperparámetros. Es empleado el método *flash laser* para realizar las mediciones a 32 marcas de aceros AISI en un rango de temperaturas de 0 a 800 °C obtenidos por laminado y recocidos. La menor incertidumbre la ofrece el modelo K-vecino más cercano en todos los casos y la mayor el ajuste progresivo de funciones. Se logran modelos más abarcadores que los registrados en la bibliografía. Se crea un software que permite al usuario obtener los valores de las propiedades objeto de estudio conociendo la composición química y la temperatura de trabajo del material.

Palabras claves: Acero; propiedades termofísicas; industria energética; modelos empíricos.

ABSTRACT

The thermophysical properties of steel are mandatory in engineering for the construction of equipment in the energy industry. The relationship between the chemical composition and the working temperature of the material does not present a linear relationship with thermal conductivity, specific heat, density or diffusivity, which is why empirical models are proposed for the prediction of these properties. The methods of progressive function fitting, K-nearest neighbor and artificial neural networks of the multilayer perceptron type with a single hidden layer are used. In the last two cases, hyperparameter optimization is applied. The flash laser method is used to carry out measurements on 32 markings of AISI steels in a temperature range of 0 to 800°C obtained by rolling and annealing. The best adjustments are offered by the K-nearest neighbor model in all cases and the worst by the progressive adjustment of functions. More comprehensive models are achieved with better adjustments than those recorded in the bibliography. Software is created that allows the user to obtain the values of the properties under study knowing the chemical composition and working temperature of the material.

Keywords: Steel; thermophysical properties; Energetic industry; empirical models.

SÍMBOLOS Y ACRÓNIMOS

A	Área [m^2]
C_p	Calor específico [$J/(kg \cdot K)$]
E	Energía [J]
m	Masa [kg].
q	Flujo de calor por unidad de superficie [W/m]
Q	Transferencia de energía en forma de calor [W].
T	Temperatura [K]
V	Volumen [m^3].
λ	Conductividad térmica [$W/(m \cdot K)$]
ΔT	Variación de temperatura [K].
ρ	Densidad [kg/m^3].
α	Difusividad [mm^2/s]
AISI	American Iron and Steel Institute
APF	Ajuste progresivo de funciones
BCC	Red cúbica centrada en el cuerpo
$D\%$	Desviación porcentual
Desv.Est.	Desviación estándar
FCC	Red cúbica centrada en las caras
HTC	Transferencia de calor convectivo
KNN	K-Vecino Cercano
MAE	Error absoluto medio
max	Máximo

MEF	Método de elementos finitos
MFL	Método Flash Laser
min	Mínimo
n	Total de mediciones para cada acero estudiado.
N	Cantidad de puntos del conjunto
PMC	Perceptrón multicapa
R^2	Coefficiente de determinación
RMSE	Raíz del error cuadrático medio de los residuales
RNA	Redes Neuronales Artificiales
SAE	Society of Automotive Engineers
X'	Valor normalizado
X	Valor real,
$\bar{X}_{(T)}$	Valor promedio
X_{max}	Valor máximo.
X_{min}	Valor mínimo.
Y_{real}	Valor experimental de la propiedad,
Y_{pre}	Valor predicho de la propiedad y
(α)	Ferrita
γ	Austenita

TABLA DE CONTENIDO

Introducción.....	1
Capítulo 1. Estado del Arte.....	5
1.1 El acero en la industria energética.....	5
1.1.1 Consideraciones iniciales.....	5
1.1.2 Sistema Hierro-Carbono.....	6
1.1.3 Propiedades termofísicas.....	9
1.2 Modelación de propiedades del acero.....	16
1.2.1 Influencia de elementos aleantes.....	17
1.2.2 Modelos de predicción y aplicaciones.....	21
1.2.3 Antecedentes en Cuba.....	25
1.3 Inteligencia artificial aplicada a la modelación de propiedades.....	27
1.3.1 Aplicación en la modelación de propiedades de los aceros.....	29
1.4 Método Flash Láser.....	31
1.5 Determinación de la incertidumbre.....	32
1.6 Conclusiones parciales del capítulo.....	33
Capítulo 2 Materiales y Métodos.....	35
2.1 Descripción de los experimentos.....	35
2.1.1 Datos experimentales empleados.....	35
2.1.2 Materiales estudiados.....	36
2.2 Mediciones experimentales.....	38
2.2.1 Análisis de las mediciones.....	40
2.3 Métodos para el tratamiento y generalización de los datos experimentales.....	46

2.3.1 Ajuste progresivo de funciones	46
2.3.2 K-vecino cercano	47
2.3.3 Red Neuronal Artificial	47
2.4 Aplicación del APF	48
2.5 Preprocesamiento de los datos experimentales	54
2.6 Aplicación del KNN	56
2.7 Aplicación de RNA	59
2.8 Conclusiones parciales del capítulo	63
Capítulo 3 Análisis de los Resultados	64
3.1 Validación de los modelos	64
3.1.1 Modelos KNN	65
3.1.2 Modelos RNA	70
3.2 Análisis y comparación de los resultados ofrecidos por los modelos	75
3.3 Validación con datos externos	85
3.4 Aplicabilidad de los modelos. Software ThermalSteel	90
3.5 Conclusiones parciales del capítulo	92
Conclusiones	93
Recomendaciones	95
Referencias Bibliográficas	96
Anexos	109

INTRODUCCIÓN

El acero es un material ampliamente utilizado en la infraestructura (Dong et al., 2020), debido a la buena combinación de propiedades que presenta, como elevada resistencia, dureza y plasticidad (Turichin et al., 2018). Las propiedades termofísicas son las que implican la respuesta de un material a un determinado suministro de calor (Callister, 2019), entre ellas la conductividad térmica y el calor específico son de obligatorio dominio para los ingenieros en transferencia de calor para poder realizar un diseño efectivo de sistemas térmicos y sus componentes sometidos a cambios de temperaturas (Somasundharam y Reddy, 2020). Estas propiedades se pueden encontrar para algunos grados de acero en la literatura (Xie et al., 2021).

Es bien conocido que las propiedades de las aleaciones de aceros son dependientes de la composición química, la temperatura de servicio y la microestructura y que la mayoría de las relaciones entre estos factores son no lineales (S. Guo, Yu, Liu, Wang, y Jiang, 2019). El alto costo económico y el tiempo que implica el método de prueba y error realizando experimentos para determinar propiedades de materiales ha conducido a numerosos científicos a trabajar en la obtención de modelos predictivos que permitan obviar esta engorrosa tarea hasta cierto punto (Correa-Baena et al., 2018). El desarrollo tecnológico actual ha permitido que la ingeniería de materiales avance como nunca antes en la historia (Borisade, Ajibola, Adebayo, y Oyetunji, 2020), aun así los modelos predictivos existentes no abordan de manera efectiva las propiedades antes mencionadas.

Según establecen Thibault y Grandjean (1991) que los problemas sobre fenómenos de transferencia de calor, estrechamente ligados a las propiedades termofísicas, que

usualmente son representados con datos experimentales y son resueltos con las apropiadas ecuaciones diferenciales o empíricamente usando análisis de regresión mostraban dificultades y que se encuentra en la literatura que los aspectos esenciales de un sistema pueden ser descritos por modelos obtenidos a partir de datos experimentales de forma útil. Por lo que para este fin proponen la aplicación de redes neuronales artificiales (RNA), sus características y como aplican a la resolución de problemas de transferencia de calor son presentadas en dicho trabajo.

Para determinar la influencia de la temperatura sobre la difusividad o la conductividad térmica deben llevarse a cabo numerosas pruebas experimentales, aunque en la actualidad el desarrollo de métodos numéricos y técnicas computacionales ha estimulado la aplicación de métodos inversos para estimar estas propiedades (Telejko, 2004).

Un modelo de conductividad térmica acertado contribuye al correcto diseño de aceros tratados térmicamente, por la influencia de esta propiedad en dicho proceso, además de elevar la comprensión del proceso de soldadura y la predicción de la fatiga termo mecánica. Un modelo con baja dispersión utilizando RNA donde se obtiene la conductividad térmica como función de la composición química y la temperatura fue obtenido por Peet, Hasan, y Bhadeshia (2011).

Para determinar el flujo de calor tridimensional y las distribuciones del coeficiente de calor en el espacio tiempo durante un proceso de enfriamiento, Malinowski, Telejko, Hadała, Cebo-Rudnicka, y Szajding (2014) utilizan el método de elementos finitos (MEF) para resolver eficazmente el problema de la conducción de calor, obteniendo valores de incertidumbre inferiores al 3%. La densidad de materiales procesados con láser de fusión selectiva es directamente influenciada por los parámetros de dicho proceso, G. Miranda

et al. (2016) encuentran los factores más significativos y sus interacciones utilizando análisis estadístico. Las curvas de enfriamiento rápido de grandes bloques de acero son de interés en la industria para lo que se debe conocer el coeficiente de transferencia de calor convectivo (HTC), Bouissa, Shahriari, Champliaud, y Jahazi (2019) han combinado MEF, con el que a partir de datos disponibles en la literatura de HTC calcula los perfiles de temperatura en ubicaciones específicas, y entrena una RNA para correlacionar los HTC iniciales con la temperatura calculada por MEF.

Tomando en cuenta lo antes expuesto, la predicción de propiedades termofísicas en aceros utilizados para la construcción de equipos en la industria energética es un tema primordial dentro de la optimización en dicha industria. Por lo que se propone en el presente trabajo como problema científico a resolver:

¿Cómo utilizar los datos experimentales disponibles, para obtener modelos de las propiedades termofísicas de aceros empleados en la industria energética, en función de la composición química y la temperatura, que superen en cuanto a amplitud y precisión a los disponibles en la literatura?

Para dar solución a este problema se plantea la siguiente hipótesis científica:

A través del uso de herramientas de aprendizaje automático, es posible obtener modelos empíricos de las propiedades termofísicas de aceros empleados en la industria energética, en función de la composición química y la temperatura, que superen en cuanto a amplitud y precisión a los disponibles en la literatura

Para validar la hipótesis se propone el siguiente objetivo general:

Desarrollar, a partir de los datos experimentales disponibles, modelos robustos y fiables, basados en técnicas de aprendizaje automático, que sean capaces de predecir las propiedades termofísicas requeridas para un amplio grupo de aceros empleados en la industria energética.

Para darle cumplimiento al objetivo propuesto se plantean los siguientes objetivos específicos:

1. Realizar un estudio de estado del arte sobre la materia, enfatizando en los principales métodos empleados para predecir propiedades de los aceros.
3. Aplicar métodos iterativos y de aprendizaje automático para obtener modelos matemáticos de las propiedades objeto de estudio.
4. Validar los modelos y realizar las comparaciones correspondientes para seleccionar el de menor incertidumbre.
5. Crear una aplicación informática basada en código abierto que permita la aplicación práctica de los modelos propuestos

La novedad científica de la investigación reside en:

La obtención de modelos, que, a partir de la composición química y la temperatura media, sean capaces de predecir un grupo de propiedades termofísicas de un amplio grupo de aceros usados en la industria energética, más abarcador que los modelos registrados en la bibliografía consultada, cuyos valores muestren un margen de incertidumbre adecuado.

CAPÍTULO 1. ESTADO DEL ARTE

El objetivo de este capítulo es definir las bases teóricas que sustentan la investigación desarrollada. Se basó en un exhaustivo estudio de la bibliografía consultada, disponible y actualizada sobre el tema.

1.1 El acero en la industria energética

1.1.1 Consideraciones iniciales

Acero es el nombre ordinario que reciben las aleaciones de hierro (Fe) – carbono (C) con proporciones de C desde 0,02 hasta 2% con concentraciones apreciables de otros elementos aleantes (Callister, 2019). Se reportan sus primeros usos en Egipto alrededor de 3000 AC (Suenaga, 2021). La siderurgia es el mayor consumidor de energía en el sector industrial, representando el 5%. El progreso en la producción gracias la tecnología actual ha alcanzado límites cercanos a los impuestos por la termodinámica, posibilitando la reducción de 50-75 *GJ/ton* de acero líquido en 1970 a 20-30 *GJ/ton* en la actualidad (Chunbao Charles y Cang, 2010; Conejo, Birat, y Dutta, 2020).

El mayor productor de acero crudo en el año 2022 fue China (74,5 Mt), seguido de India (10,4 Mt), Japón (7,2 Mt), Estados Unidos (6,4 Mt) y Rusia (5,6 Mt). Estas potencias de la siderurgia reportan el 75% de la producción mundial (Galimberti, Cimini, Copani, Malfa, y Cavalieri, 2022; Yanxin Liu et al., 2020; STUDIES, 2022).

El acero ha sido clasificado por diferentes organizaciones nacionales e internacionales basándose en disímiles criterios. La comparación entre normas no es una ciencia exacta. Un basamento útil para establecer equivalencias es la composición química y las

propiedades mecánicas, aun así, pequeñas diferencias en estos aspectos pueden ser decisivas para un usuario e insignificante para otro (Bringas, 2002). La designación de aceros normada por *American Iron and Steel Institute* (AISI) y la *Society of Automotive Engineers* (SAE) es escogida para esta investigación debido a su basamento en la composición química (Boyer y Gall, 2006).

1.1.2 Sistema Hierro-Carbono

Los principios básicos del desarrollo microestructural se pueden explicar mediante el diagrama de equilibrio hierro-carbono (Shackelford, Güemes, y Martín, 2010). Este diagrama es un mapa de las fases que existen en el hierro a diversos contenidos de carbono y temperaturas en condiciones de equilibrio. Esta investigación se reduce a los aceros en el rango de 0 a 800°C.

En este rango ocurren determinadas reacciones invariantes, estas se analizan y detallan bajo condiciones de equilibrio, en esta zona también se ubica la línea de temperatura a la que el hierro pierde sus propiedades magnéticas a la temperatura de 768 °C (Smith, Hashemi, Cázares, y González-Caver, 2006). En la figura 1.1.a es mostrada la reacción eutectoide, la cual ocurre en 0,77% de C. En la misma es ubicado el punto eutectoide con coordenadas 0,77% de C y 727 °C y se traza una recta vertical pasando por este ($\overline{x\ x'}$).

Siguiendo la trayectoria de $\overline{x\ x'}$, por encima de 727 °C únicamente se encuentra la fase austenita (γ), que es una solución sólida intersticial de carbono en hierro (Machado, Toda-Caraballo, Garcia-Mateo, y Aristizábal-Sierra, 2021), la estructura cristalina de la fase γ es del tipo cúbica centrada en las caras (FCC). Con temperaturas inferiores a 727 °C la composición es de perlita, que consiste en una mezcla de dos fases, la ferrita (α),

que es una solución sólida intersticial de carbono en hierro con estructura cristalina cúbica centrada en el cuerpo (BCC), que podrá existir prácticamente en todo el rango de temperatura estudiado en este trabajo, y cementita, que es un carburo de hierro con formulación química (Fe_3C), que se encuentra a la derecha de $\overline{x x'}$ y por debajo de A_3 .

En la figura 1.1.b es representada la reacción invariante hipoeutectoide, se encuentre en la zona entre 0,022% y 0,77% de C, al trazar una recta vertical ($\overline{y y'}$). Para esta investigación son de interés los puntos d, e y f . Entre 727 y 800 °C coexisten las fases α , llamada ferrita proeutectoide y γ , al ser menor la temperatura es mayor es el tamaño del grano de hierro (α). Con temperaturas inferiores a 727 °C coexisten la ferrita proeutectoide y la perlita.

Construyendo la recta vertical $\overline{z z'}$ a la derecha de 0,77% de C ocurre una reacción hipereutectoide como se observa en la figura 1.1.c. Para esta investigación son de interés los puntos h e i . Sobre 727 °C coexisten dos fases, γ y Fe_3C , llamada cementita proeutectoide; al disminuir la temperatura aumenta el tamaño de grano de la cementita. Bajo 727 °C coexisten la cementita proeutectoide y la perlita.

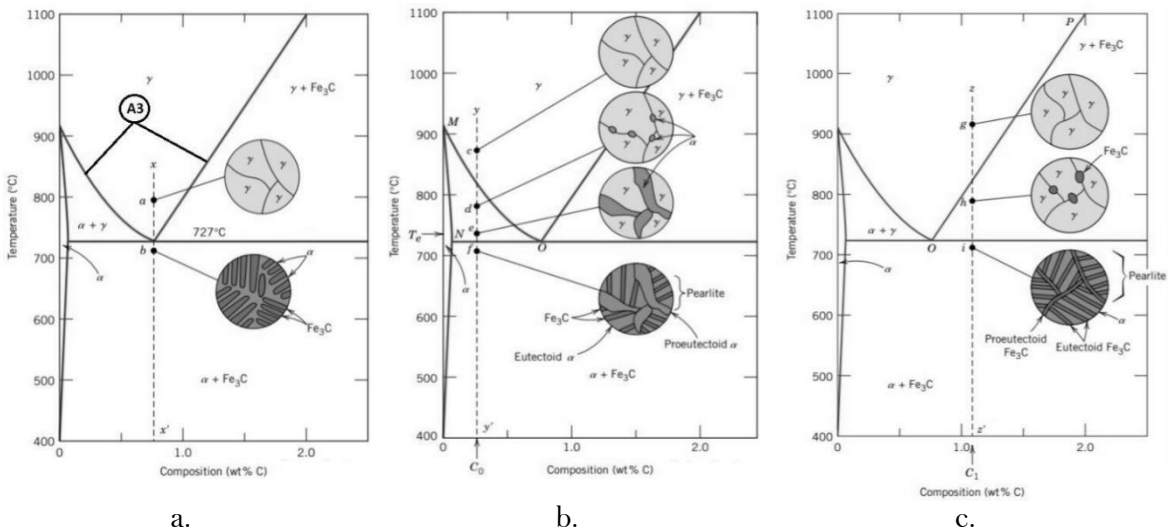


Figura 1.1. Transformaciones microestructurales del acero. a) Reacción eutectoide b) Reacción hipoeutectoide c) Reacción hipereutectoide. Fuente: (Callister, 2019).

Los elementos que conforman una aleación hacen que la temperatura eutectoide del diagrama de fases Fe-C aumente o disminuya. Es considerado un elemento estabilizador de austenita aquel que hace que la temperatura eutectoide disminuya, agrandando la región austenítica del diagrama de fases Fe-C, tanto el Mn como el Ni realizan esta función (Raghavan, 1995). Los elementos formadores de carburo, como el Cr, el W, el Mo y el Ti, elevan la temperatura eutectoide del diagrama de fases Fe-C a valores más superiores y reducen el campo de la fase austenítica (Dadé, Malaplate, Brachet, Guilbert, y Toffolon-Masclat, 2019). Dichos elementos reciben el nombre de elementos estabilizadores de ferrita o ferritizadores. En la figura 1.2 se evidencia la influencia de los elementos aleantes sobre la temperatura de transformación eutectoide; en ella no se encuentran representados el C o el Ni, pero también son elementos estabilizadores de austenita.

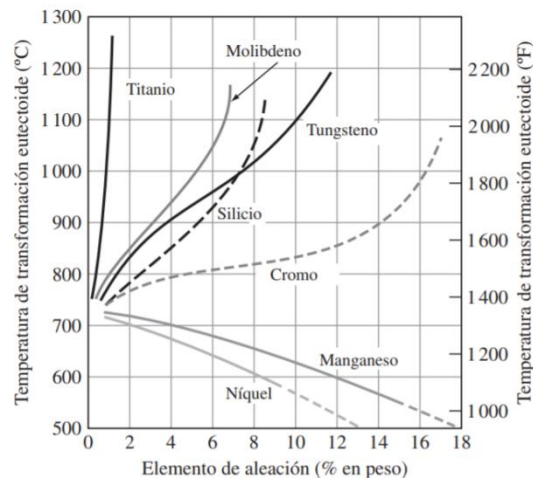


Figura 1.2. Influencia de elementos de aleación sobre la temperatura de transformación eutectoide (Smith et al., 2006)

Es científicamente probado que las propiedades de una aleación de acero están condicionadas por su composición química (Hernandez-Duran, Corallo, Ros-Yanez, Castro-Cerda, y Petrov, 2021; G.-h. Wang y Li, 2020; G. Wang y Li, 2019), temperatura de trabajo y microestructura (Ahadi Akhlaghi, Salkhordeh Haghighi, Kahrobaee, y Hojati, 2020; Narayana et al., 2020; Reddy, Krishnaiah, Hong, y Lee, 2009) y que la mayoría de las relaciones entre estos factores son no lineales (S. Guo et al., 2019).

1.1.3 Propiedades termofísicas

Las propiedades termofísicas son aquellas que implican la respuesta de un material ante un determinado suministro de calor. Para realizar un diseño efectivo de sistemas térmicos y componentes sometidos a cambios de temperatura, deben conocerse los valores de las propiedades termofísicas de los materiales a emplear (Somasundharam y Reddy, 2020). Se encuentran disponibles en la literatura los valores de estas propiedades para algunos grados de acero (Xie et al., 2021).

1.1.3.1 Conductividad térmica

Entiéndase por conductividad térmica como la transmisión de energía de la zona caliente a la zona fría en un sólido al que se le suministra calor (Medina, 2020). Es el parámetro físico que permite caracterizar y cuantificar la capacidad del material para conducir calor (Otero-de-la-Roza, Abbasi-Pérez, y Luaña, 2011). Según Fultz (2010), el suministro de calor provoca la vibración de los átomos, a su vez esto provoca un aumento de energía cinética que es transmitida a los átomos contiguos, dicha transmisión de energía ocurre por los electrones libres de la red.

Su magnitud es diversa para los diferentes metales y aleaciones; y su tendencia varía con la temperatura (Toberer, Baranowski, y Dames, 2012). Según define Yang (2007) la conductividad térmica se escribe la ecuación (1.1)

$$\lambda = \frac{q}{s \cdot \Delta T} \quad (1.1)$$

Dónde: λ es la conductividad térmica, en $W/(m \cdot K)$; q es el flujo de calor por unidad de superficie, en W/m^2 ; s es el espesor, en m ; ΔT es la variación de temperatura, en K .

Se reporta por Tritt (2005) que la medición de la conductividad térmica ha sido empleada como herramienta para investigar defectos de red o imperfecciones en sólidos, además es de gran interés tecnológico en ramas como la electrónica. Según lo expresado por la ley de Wiedemann-Franz, para la mayoría de los metales y aleaciones, λ es proporcional a la conductividad eléctrica (J. Chen, Xu, Zhou, y Li, 2022). Para la fabricación de intercambiadores de calor industriales, radiadores de vehículos y disipadores de calor, el cobre es ampliamente utilizado debido a sus buenas propiedades térmicas, químicas y mecánicas como el bajo costo en comparación con la plata (Chung, 2001).

Cuando se hace imperativo por las condiciones extremas de trabajo que implican altos requerimientos de resistencia mecánica y estabilidad térmico-química para mantener el rendimiento y la seguridad del sistema son empleadas superaleaciones a pesar de presentar valores inferiores de λ (Zheng, Hao, Miao, Schaadt, y Dames, 2021). Tal es el caso en intercambiadores de calor para altas temperaturas donde se emplean superaleaciones con base de níquel (Kumaraswamy, Kumar, y Purushotham, 2022).

En determinadas aplicaciones donde se requiere elevada conductividad eléctrica y térmica a la par de una elevada resistencia mecánica, como en los conductores empleados para ferrocarriles eléctricos se describe cómo estos efectos se pueden desacoplar en gran medida gracias al fortalecimiento de las aleaciones metálicas por límites de grano y límites maclas, logrando buenas prestaciones en las características de interés siempre que el espacio promedio entre estos límites sea mayor que el camino del electrón libre medio (Ke et al., 2019; Zhu et al., 2022) . Los autores X. Li, Wei, Lu, Lu, y Gao (2010) exponen que el Cu con alta densidad de maclas a nanoescala es 10 veces más resistente y conserva el 95% de la conductividad eléctrica que el Cu puro con granulometría mayor.

1.1.3.2 Calor específico

El calor específico es definido como la cantidad de calor que se necesita suministrar a una unidad de masa de un material para elevar su temperatura en una unidad (Cengel y Boles, 2007). La cantidad de calor (Q) necesaria para elevar la temperatura de una masa m de un determinado material desde T_1 a T_2 es aproximadamente proporcional al cambio de temperatura, con estas conclusiones es posible escribir la ecuación (1.2) (Nathan, 1951).

$$Cp = \frac{Q}{m \cdot \Delta T} \quad (1.2)$$

Dónde: Cp es el calor específico, en $J/(kg \cdot K)$. Q es la transferencia de energía en forma de calor, en J . m es la masa del sólido, en kg . ΔT es la variación de temperatura, en K .

La necesidad ingenieril de conocer el calor específico de las distintas denominaciones de acero en amplios rangos de temperaturas ha propiciado que se realizaran mediciones experimentales a un grupo de ellos. Demuestran que la estimación de esta propiedad basada en el calor específico de sus componentes resulta poco precisa. Son explicadas dispersiones significativas en las mediciones para distintos grados de aceros a baja temperatura a partir de la composición química de la aleación (Corsan y Mitchem, 1979; Du Chatenier, Boerstael, y De Nobel, 1965).

En metales puros Eser y Koç (2016) expone que puede ser estimada la conductividad térmica dependiente de la temperatura con un modelo estadístico propuesto y las funciones de Debye (Beyerlein, 2013) en un rango de 0 a 1750 °C, con los mejores resultados a bajas temperaturas ($T < 250$ °C). En la investigación de Mehmetoglu (2019) se aplica una metodología similar para materiales empleados como combustible nuclear y de igual forma el modelo obtenido es adecuado.

Es confirmado por Fukuyama, Higashi, y Yamano (2022), a partir de un estudio experimental en el que realiza mediciones detalladas por Tsukada, Fukuyama, y Kobatake (2007), que en estado líquido y a presión constante la conductividad térmica del acero no es dependiente de la temperatura.

Ha sido calculado el calor específico de 53 materiales sólidos, incluidos aceros, por Rowe, Chubukov, y Telotte (2022), empleando la ecuación de Hill (Magnus y Winkler, 2013), el modelo de Debye y el modelo de Einstein (Varga, 2022). Con la ecuación de Hill son obtenidos los mejores resultados, con una incertidumbre de $0,37 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$, inferior a los 0,45 y 0,81 obtenidos al aplicar Debye y Einstein respectivamente.

1.1.3.3 Densidad

La densidad es definida como la cantidad de masa de un material por unidad de volumen. Es una propiedad intrínseca del material, ya que no depende de la cantidad de sustancia que se considere (Askeland, Fulay, y Wright, 2017). La expresión matemática (1.3) expresa como realizar el cálculo:

$$\rho = \frac{m}{V} \quad (1.3)$$

Dónde ρ es la densidad en kg/m^3 . m es la masa en Kg . V es el volumen en m^3 .

La densidad es una propiedad física fundamental de los materiales para la ingeniería, especialmente para determinar el peso de una determinada estructura conociendo su volumen. Generalmente se realizan cálculos de ingeniería con valores de 7,8 y 7,9 kg/m^3 para aceros, y esto no contempla la composición química, el tratamiento térmico o el método de obtención, llevando inevitablemente a inexactitudes apreciables (Valencia y Qusted, 2001).

La reducción del peso en la ingeniería estructural es clave, esto ahorra material y energía, en otros sectores como la industria automotriz resulta también de especial interés, en este caso implica también la reducción de emisiones de gases contaminantes (Buberger et al., 2022). El acero de baja densidad, constantemente en proceso de patente debido a las nuevas aleaciones descubiertas, es una excelente opción gracias a la relación propiedades-costos que presenta (Rana, 2014). La relación entre densidad y resistencia mecánica es graficada en la figura 1.1

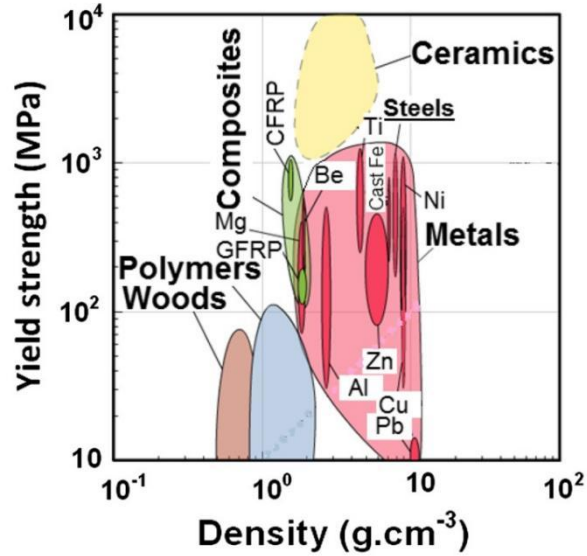


Figura 1.1. Comparación de densidad y resistencia mecánica de un grupo de aceros empleados en la ingeniería (Hirsch, Leroy, y Green, 2023).

1.1.3.4 Difusividad térmica

La difusividad térmica, propiedad específica de cada material que caracteriza la conducción de calor en condiciones no estacionarias, es definida por Lee y Taylor (1978) como la rapidez con que un material reacciona a un cambio de temperatura. En la ecuación (1.4) es presentada su formulación matemática.

$$\alpha = \frac{\lambda}{\rho \cdot Cp} \quad (1.4)$$

Dónde α es la difusividad en m^2/s .

Existen varios métodos de estimación de esta propiedad registrados en la literatura, estos pueden dividirse en dos grupos de acuerdo a la naturaleza del campo de temperaturas en la muestra, dígase, métodos transitorios y métodos periódicos

(Ferreira-Oliveira, De Lucena, Dos Reis, De Araújo, y Bezerra-Filho, 2022). Esta propiedad es correlacionada por Ghrib, Boubaker, y Bouhafs (2008) con la micro dureza mediante polinomios para diferentes microestructuras de aceros, presentando diferencias en el tipo de dependencia, como limitante, no realiza mediciones en muestras tratadas térmicamente.

En aplicaciones biomédicas también es de interés esta propiedad, como es reflejado por Rodríguez et al. (2002), quienes plantean que el valor de la difusividad es extremadamente sensible a la composición química del material y a su microestructura.

La medición de esta propiedad es de interés para evaluar los procesos de calentamiento y enfriamiento, las dificultades que presenta la geometría de la muestra para determinados métodos de medición han conducido a que sea permanente la investigación en este campo. Los autores Nolte, Malvisalo, Wagner, y Schweizer (2017), plantean que el empleo de termografía en condiciones ambientales y al vacío permite ajustar una curva para muestras obteniendo resultados robustos en comparación con los expuestos por la literatura para muestras en condiciones ambientales y demuestran que las mediciones al vacío no causan modificaciones en los valores.

Los autores Adamczyk, Białocki, Orlande, y Ostrowski (2020) han conseguido que mediante el escaneo del campo de temperaturas y la búsqueda de los máximos, se necesite solamente conocer el instante de tiempo en que este máximo ocurre y no sea necesario procesar toda la variación temporal de la temperatura del campo en cada píxel. La dependencia entre la difusividad y este tiempo máximo es muy simple y no es necesario evaluar integrales infinitas ni series infinitas al procesar los resultados. Como limitante se aprecia que no está resuelto cómo extender el método a cuerpos pequeños

con forma arbitraria. Por otra parte ElSheikh, Barakat, Abu-Nabah, y Hamdan (2022) proponen para aleaciones metálicas una técnica basada en la termografía en una sola dimensión que emplea un flujo uniforme de calor que resulta simple y permite una estimación precisa de la difusividad térmica.

En cuanto a la estimación de esta propiedad en materiales compuestos el autor Carson (2022) compara modelos que pueden clasificarse en términos generales en cuatro tipos, ajuste de curvas empíricas, difusividad térmica efectiva ponderando promedios de las difusividades térmicas y fracciones de volumen de los componentes, calculada a partir de la conductividad térmica efectiva, la densidad efectiva, comparación de tiempos para una cantidad fija de calor a ser transferido a un material compuesto con el tiempo de transferencia de calor para un material con conocida efectividad difusividad térmica. Concluye que ninguno se desempeñó consistentemente mejor que los demás, lo que indica que hay margen para seguir trabajando en esta área.

1.2 Modelación de propiedades del acero

El empleo del método experimental para determinar propiedades de materiales resulta costoso y complejo, esta problemática implica que la comunidad científica trabaje en la obtención de modelos predictivos que permitan simplificar esta tarea (Correa-Baena et al., 2018). Se han realizado correlaciones que permiten luego realizar predicciones (C. Wang et al., 2021), partiendo de análisis estadísticos de datos obtenidos en experimentos previos (Algarra, 2006; Peña, 2002). La relación entre la microestructura, las propiedades y los parámetros de procesado de materiales, vinculados a una correcta

predicción y una adecuada tecnología de control son clave para el control de la calidad y la reducción de costos.

1.2.1 Influencia de elementos aleantes

Cada elemento de aleación en particular influye en la microestructura y propiedades del acero, modificando las características del diagrama Fe-C (Yikang, 1999). Son presentados en este apartado los principales efectos sobre el acero de los elementos de interés para esta investigación.

El principal elemento de aleación en el acero es el carbono (C), influye considerablemente en la dureza y la resistencia, además es económico (Salas y Magdaleón, 2009a). Es un elemento intersticial que ocupa sitios entre los átomos de hierro más grandes en las redes BCC y FCC. Como efecto negativo del carbono sobre las propiedades se aprecia que el porcentaje de reducción de área disminuye al aumentar el porcentaje de carbono, así como la tenacidad y la energía absorbida por impacto cuando se hace el ensayo de Charpy (Alvaredo, Bruna, Crespo, y Gordo, 2018).

El manganeso (Mn) es un elemento fundamental en los aceros al carbono, de baja aleación y aleados. Es utilizado para que todo el azufre residual se combine para formar sulfuro de manganeso, evitando que el azufre se combine con el hierro y forme sulfuro de hierro, reduciendo la tenacidad y ductilidad. También es empleado para fortalecer el acero, ya que es un elemento sustitutivo y puede reemplazar los átomos de hierro en la red BCC o FCC (He et al., 2020). Según Ashong et al. (2019), reduce la temperatura de transformación eutectoide y reduce el contenido de carbono eutectoide. En cantidades superiores al 12%, es un estabilizador austenítico en aceros aleados y forma una clase

especial de aceros llamados aceros austeníticos al manganeso (*Hadfield*), que son empleados cuando se requiere una elevada resistencia al desgaste, o en general un endurecimiento del material durante la deformación por transformación martensítica durante esta deformación. (Jafarian, Sabzi, Mousavi Anijdan, Eivani, y Park, 2021).

El fósforo (P) es considerado un elemento residual en el acero y se restringe intencionalmente a niveles generalmente por debajo del 0,02%. Es un elemento intersticial que puede fortalecer considerablemente el hierro, por lo que es agregado a una clase especial de aceros llamados aceros refosforizados para obtener una mayor resistencia, elevando además la maquinabilidad (Zhang et al., 2019). Ha sido detectado por Y. Guo, Wang, y Song (2020) que una pequeña adición de fósforo puede desempeñar un papel positivo en la mejora de la ductilidad en caliente del acero (Guo et al., 2020).

El azufre (S) también es considerado un elemento residual en el acero por lo que el contenido máximo generalmente no excede el 0,02%. Aunque es un elemento con un diámetro atómico pequeño, no se considera un elemento de aleación intersticial porque es insoluble en hierro (Siyasiya y Stumpf, 2008). Puede emplearse para obtener una clase especial de aceros llamados aceros resulfurizados que tienen una maquinabilidad mejorada son denominados aceros de mecanizado libre (Nickel, Baak, Biermann, y Walther, 2018).

El silicio (Si) es agregado a aceros al carbono y de baja aleación para eliminar el oxígeno disuelto del acero fundido durante el proceso de refinado del acero ya que el oxígeno es un elemento indeseable en el acero porque forma inclusiones de óxido que pueden disminuir la ductilidad, tenacidad y resistencia a la fatiga (B. Sun et al., 2018). Es un estabilizador de ferrita y se encuentra en algunos aceros inoxidable (D. Li et al., 2015).

El níquel (Ni) mejora la templabilidad del acero, por lo que es empleado en aceros de baja aleación. Es un elemento sustitutivo de la red de hierro y tiene un pequeño efecto sobre el aumento del límite elástico, no forma carburo y permanece en solución sólida. Es un estabilizador de austenita, por lo que es fundamental en los aceros inoxidable austeníticos (Marshall, 1984), en estos aceros cuando es agregado níquel con cromo, el campo de la fase austenítica se expande, lo que permite que la austenita sea estable a temperatura ambiente (Ares et al., 2005).

El cromo (Cr), como el Ni, tiene un efecto positivo sobre la templabilidad y es un elemento de aleación importante en muchos aceros de baja aleación. El cromo está presente en todos los aceros inoxidable como un elemento de solución sólida para mejorar la resistencia a la corrosión, incluida la oxidación, en que la formación de Cr_2O_3 crea una capa resistente y casi impermeable a la difusión del oxígeno desde la atmósfera circundante al metal. (Meng et al., 2018). Además, el Cr forma varios carburos de cromo que son necesarios para la resistencia al desgaste en aceros para herramientas y aceros utilizados para rodillos en laminadores en caliente y en frío (J. Hu et al., 2018).

El molibdeno (Mo) es un potente elemento de templabilidad y se encuentra en muchos aceros de baja aleación, como el Cr, forma varios tipos de carburos que son importantes para solicitaciones de resistencia al desgaste. Es agregado para minimizar la fragilización por temple en aceros de baja aleación, que ocurre cuando se templan en el rango de temperatura de $260\text{--}370^\circ\text{C}$ (Hua et al., 2018). La fragilización es causada por elementos como el fósforo que se acumulan en los límites de grano de austenita anteriores, debilitando los límites (Gramlich, van der Linde, Ackermann, y Bleck, 2020). El molibdeno también mejora la resistencia a la fluencia de los aceros de baja aleación a

temperaturas elevadas y es empleado en aceros que trabajan en rotores y otras partes de generadores en plantas de energía eléctrica

El vanadio (V) es un potente elemento de endurecimiento, pero su mayor utilidad radica en la formación de nitruro de vanadio y carburo de vanadio que también puede estar en una forma combinada de carbonitruro de vanadio (Fu, Davis, Kumar, Richardson, y Hermans, 2021) Es vital el uso de V en los aceros microaleados o aceros de alta resistencia y baja aleación (HSLA). Estos aceros son reforzados mediante la precipitación de nitruros de vanadio y carburos de vanadio. La formación de carburo de vanadio es importante para la resistencia al desgaste (Fu et al., 2021). El carburo de vanadio es mucho más duro que el carburo de hierro, el carburo de cromo y el carburo de molibdeno (Moro, Gonzalez, Brizuela, Juan, y Simonetti, 2008). Por tanto, el vanadio es fundamental en los aceros para herramientas de alta velocidad (Pacyna y Dąbrowski, 2006).

Basado en la influencia de la composición química de aceros inoxidable es posible predecir su microestructura a partir del cálculo del cromo equivalente y el níquel equivalente, y utilizando el diagrama de Schaeffler o diagrama estructural de los aceros inoxidable que define las fases presentes en los aceros aleados en función del contenido de elementos austenitizadores y ferritizadores, se consigue determinar la microestructura; conociendo la microestructura se consiguen hacer análisis de propiedades (Fernández-Columbié et al., 2019). Es de utilidad para seleccionar el metal de aporte en soldaduras con el objetivo de obtener una microestructura deseada, además se emplea para predecir la resistencia a la corrosión y la resistencia mecánica de estos materiales (Ning, Zhang, Chen, Zhang, y Na, 2022).

1.2.2 Modelos de predicción y aplicaciones

La predicción de propiedades con la asistencia de ordenadores es registrada en la bibliografía desde hace aproximadamente tres décadas por (Kwon, 1992), quién logró predecir los cambios microestructurales que ocurren durante el laminado en caliente y el enfriamiento de los aceros para controlar las propiedades mecánicas obtenidas durante la producción. Esta tecnología, basada en la metalurgia física, describe cuantitativamente el comportamiento de las transformaciones que ocurren durante el proceso y resulta un aporte para el control de la calidad y al control de procesos. Como aspecto negativo destaca la dificultad del modelo para ser aplicado en una producción real, por lo que para ese momento resultó inoperante.

En la década siguiente (2000-2010) el desarrollo tecnológico hace posibles avances considerables en las modelaciones. Los cambios de densidad del acero inoxidable con las fases en el rango de 500 a 1700 °C son analizados por Mizukami, Shirai, Yamanaka, y Watanabe (2000) para optimizar las condiciones de colada a partir de las propiedades mecánicas durante la solidificación. Aunque se confirma la relación de los cambios de densidad respecto a la temperatura con el contenido de Cr y Ni no se tienen en cuenta el resto de los elementos aleantes. De manera similar es analizado el fenómeno en aceros al carbono por Mizukami, Yamanaka, y Watanabe (2002), quienes consideran las variaciones de Si, Mn, P y S en la aleación para determinar la influencia del C en las fases y en la densidad.

Para resolver la ecuación de conducción de calor es necesario conocer, entre otros parámetros, las propiedades termofísicas del material. La precisión en el valor de dichas propiedades influye considerablemente en los resultados de los cálculos del campo de

temperaturas. Para ello Telejko (2004) propone aplicar el método inverso con el fin de determinar de forma simultánea la conductividad térmica y el calor latente de cambio de fase a partir de la resolución de la ecuación de conducción de calor por el MEF, el resultado estimado presenta buena correspondencia con los experimentales. El MEF también es empleado por Şimşir y Gür (2008) para modelar efectivamente las tendencias en la distribución de la microestructura y las tensiones residuales durante tratamientos térmicos, que dependen del fenómeno de transferencia de calor que ocasiona la evolución microestructural.

Es demostrado por Sugianto, Narazaki, Kogawara, y Shirayori (2009) que para estimar la temperatura dependiente del coeficiente de transferencia de calor es más preciso emplear el método de modificaciones iterativas de capacidad calórica concentrada que el de transferencia de calor inversa para predecir las curvas de enfriamiento, de velocidad de enfriamiento y la distorsión de piezas de acero tratadas térmicamente. Esta confirmación es basada en experimentación y simulaciones por computadora empleando el software DEFORM-HT 2D. Resulta complicado para su aplicación al necesitar una comprensión profunda de la transferencia de calor por convección.

El efecto del contenido de carbono y la temperatura en la conductividad térmica, el calor específico y el coeficiente de expansión lineal en el rango de 0 a 800 °C en aceros al carbono es determinado con el desarrollo de regresiones múltiples por Yafei, Yongjun, Jing, y Dongjie (2009), quienes obtienen modelos con incertidumbre adecuada. Es probado que el carbono tiene un efecto significativo en la conductividad térmica y no en el calor específico. No tienen en cuenta el efecto de otros elementos aleantes en la

conformación del modelo, lo que excluye del mismo el efecto de las interacciones entre ellos.

En la evaluación metalúrgica previa al diseño de estructuras contra incendios es imprescindible la determinación de las propiedades térmicas del material. Con esta finalidad Fang, Wong, y Bai (2015) explican la variación del calor específico a altas temperaturas con el uso de la teoría cinética para describir el comportamiento molecular en el acero como resultado del aumento de temperatura, logrando buenos resultados con modelos sencillos. La densidad como dependencia de los parámetros del proceso de fusión selectiva por láser en acero inoxidable es relacionada mediante métodos estadísticos por G. Miranda et al. (2016), reforzando la importancia de la creación de herramientas de diseño predictivo en la eficiencia de los procesos.

La microestructura de una junta soldada puede evaluarse a partir de los diagramas de enfriamiento continuo. En este sentido Piekarska y Goszczyńska-Króliszewska (2017) consiguen obtener dichos diagramas aplicando métodos analíticos sobre la base de la composición química del acero. Esta opción es útil y económica en comparación con investigaciones experimentales. Se aplica para la obtención de datos de entrada en análisis numéricos de tensiones y deformaciones en elementos soldados con el fin de realizar estimaciones preliminares de materiales.

En la industria automotriz es necesario que los materiales empleados sean a la vez ligeros y resistentes, este es el caso de acero al boro 22MnB5 ; estas propiedades dependen de la microestructura conseguida durante el enfriamiento en el tratamiento térmico. El uso de enfriamiento por rociado para este fin es ventajoso porque permite personalizar una pieza con diferentes microestructuras controlando en proceso. Para

conseguir realizar el procedimiento es necesario conocer las propiedades térmicas del material. Plantean Gao et al. (2019) que el coeficiente de transferencia de calor interfacial dependiente de la temperatura, necesario para evaluar la intensidad de la transferencia de calor y la distribución de temperatura, sea estimado por el método no lineal de Beck.

Una alternativa de bajo costo computacional y corto tiempo de ejecución para estimar propiedades mecánicas de aceros de bajo contenido de carbono es propuesta por Borisade et al. (2020). Para la modelación tienen en cuenta un amplio grupo de elementos presentes en la composición del material, la comprobación estadística resulta favorable. El empleo del aprendizaje automático resulta ventajoso al contar con una amplia base de datos experimentales.

En otras ramas de la ingeniería es necesario realizar el modelado de propiedades. En la soldadura por fricción bajo el agua entre diferentes materiales es realizado el modelado termodinámico por Derazkola, Eyvazian, y Simchi (2020), necesario para llevar a cabo un diseño de estructuras compuestas eficiente. En el diseño de intercambiadores calor fabricados mediante manufactura aditiva para conseguir bloques porosos es necesario modelar la conductividad térmica efectiva. Obtienen N. Wang, Kaur, Singh, y Li (2021) un modelo computacional con el que comparan diferentes topologías y definen una óptima. También Xing, Wang, y Al-azzani (2021) proponen ecuaciones para estimar la conductividad térmica, el calor específico y la expansión térmica, con el objetivo de realizar simulaciones en estructuras bajo la influencia de incendios en el rango de 25 a 1000°C, solamente es validado para siete marcas de aceros.

La termometría ultrasónica usada para estimar temperatura está fundamentada en que una onda viaja más lenta en un material sólido cuando aumenta la temperatura. Las curvas de retrasos de tiempo asociados con las variaciones de temperatura son desarrolladas por Ettini, Cotter, y Guldiken (2022). El valor obtenido depende, entre otros factores de la estimación del coeficiente de expansión térmica, el módulo de Young y la relación de Poisson, los cuales han sido considerados con base en los valores de temperatura, por lo que es imprescindible una estimación precisa de estas propiedades.

1.2.3 Antecedentes en Cuba.

Investigadores nacionales han dedicado esfuerzos a la modelación de propiedades, tal es el caso de Salas y Magdaleón (2009b), que investigan la influencia del C en las propiedades del acero para refuerzo de hormigón, los autores realizan un análisis profundo sobre la influencia para construcciones en localizaciones afectadas por sismos. Por las características del estudio no es posible extender a otros materiales ni otras aplicaciones ya que no obtienen modelos con este fin.

También para aplicaciones en el campo de la construcción Jiménez-Sánchez y Arzola-Ruiz (2017) usan redes neuronales de base radial para estimar las propiedades mecánicas de las hornadas a partir de su composición química y sección transversal del perfil terminado, empleando datos acumulados de ensayos mecánicos en los talleres donde son producidas barras corrugadas de acero, logrando buena calidad de las opciones de destino de las hornadas producidas, garantizando una mejor distribución de los recursos de la empresa. En ninguna de estas investigaciones se mencionan las propiedades termofísicas.

Los autores Martínez-Pérez, Collazo-Carceller, Autié-Pérez, y Valín-Rivera (2021) han analizado los valores de las propiedades termofísicas y mecánicas termo-dependientes y diagramas necesarios a altas temperaturas para la simulación de un proceso de soldadura de aceros 2.25Cr-1Mo partiendo de las composiciones brindadas en la literatura especializada, estos se encuentran en correspondencia con los reportados en la literatura. La estimación es realizada con la propuesta de Zhanli Guo, Saunders, Miodownik, y Schillé (2008), que no tiene en cuenta las interacciones entre elementos que conforman las aleaciones.

Los investigadores Camaraza-Medina, Hernandez-Guerrero, y Luviano-Ortiz (2022) consiguen excelente correlación con los modelos propuestos para un amplio grupo de más de 30 marcas de aceros empleando el método de ajuste progresivo de funciones. No realizan comparaciones con modelos dedicados a grupos de aceros similares, lo que podría potencialmente mejorar la precisión de estos. No existen evidencias de modelos similares en la literatura, por lo que es considerado una novedad en la ciencia.

Los autores Villalonga, Medina, Morales, Mediaceja, y Gonzalez (2023) consiguen predecir la influencia de la composición y temperatura de operación sobre las propiedades termofísicas en los aceros inoxidable austeníticos AISI 301, 302, 304, 310 y 316, que resumen la variación de la conductividad térmica, calor específico, difusividad y densidad, Los datos experimentales disponibles fueron procesados mediante técnicas aprendizaje automático, desarrollando un modelo que permite computar las propiedades termofísicas objeto de estudio con una incertidumbre inferior al 25 % en el 90 % los datos experimentales disponibles. El modelo se centra solamente en un grupo pequeño de materiales, siendo esta la principal limitante de dicha investigación

1.3 Inteligencia artificial aplicada a la modelación de propiedades

Las redes neuronales artificiales (RNA) son sistemas de procesamiento de la información cuya estructura y funcionamiento están inspirados en las redes neuronales biológicas. Consisten en un conjunto de elementos simples de procesamiento llamados nodos o neuronas conectadas entre sí por conexiones que tienen un valor numérico modificable llamado peso (Moreno, 2002).

En su mayoría, las RNA deben entrenarse, a diferencia de otros softwares que son programados para realizar tareas específicas. Las RNA aprenden nuevas asociaciones, nuevos patrones y nuevas dependencias funcionales. El aprendizaje corresponde a cambios de parámetros. Las reglas y algoritmos utilizados para el entrenamiento experimental de redes reemplazan la programación requerida para la computación convencional. La computación del sistema neuronal artificial se encuentra en el término medio entre la ingeniería y la inteligencia artificial (Zurada, 1992).

Modelar la forma de procesamiento de la información en sistemas nerviosos biológicos resulta la motivación de las investigaciones en torno a las RNA, que pueden realizar numerosas operaciones simultáneamente, difiriendo de las computadoras convencionales que son secuenciales. Las ventajas que trae el empleo de una RNA son la capacidad de adquirir conocimiento partiendo de experiencias, la adaptabilidad que permite cambiar dinámicamente con el medio, el alto nivel de tolerancia a fallas y el comportamiento altamente no lineal que permite procesar información de fenómenos no lineales (Izaurieta y Saavedra, 2000).

La neurona constituye el elemento fundamental de una RNA. En ella, la suma de las n entradas x_j de la neurona i , ponderadas con los pesos sinápticos w_{ij} , genera la entrada ponderada total o potencial postsináptico de la neurona i . Los pesos sinápticos w_{ij} miden la intensidad de la interacción entre las dos neuronas que están conectadas por el enlace. Posteriormente, se aplica una función de activación o transferencia (f) a la diferencia entre el potencial postsináptico y el umbral θ_i , obteniéndose la salida de la neurona (y_i) (Nacelle y Mizraji, 2009). El modelo matemático más elemental está dado por la ecuación (1.5).

$$y_i(t) = \left(\sum_{j=1}^n w_{ij}x_j - \theta_i \right) \quad (1.5)$$

El tipo de RNA perceptrón multicapa, puede formar regiones de decisión arbitrariamente complejas y pueden separar varios patrones de entradas. La capacidad del perceptrón multicapa se deriva de la no linealidad existente dentro de los nodos (López y Fernandez, 2008).

Está constituido por tres o más capas; la capa de entrada, que recibe información de fuentes externas y envía esta información a la red para su procesamiento. La capa oculta recibe información de la capa de entrada y la procesa de forma oculta. No tiene conexiones directas con el exterior. La capa de salida recibe información procesada y envía señales de salida fuera del sistema. El sesgo actúa sobre una neurona como una compensación. La función del sesgo es proporcionar un umbral para la activación de

neuronas. La entrada del sesgo está conectada a cada uno de las neuronas ocultas y de salida en una red (Fausett, 2006).

1.3.1 Aplicación en la modelación de propiedades de los aceros.

La modelación empleando RNA ha ofrecido excelentes resultados en el campo de las propiedades del acero como exponen en su investigación Z. Guo y Sha (2004), quienes usan como variables de entrada a una red la composición química, la temperatura de trabajo y parámetros de fabricación para obtener estimaciones de propiedades mecánicas de aceros martensíticos. De igual forma Reddy et al. (2009) consiguen un modelo aceptado, además considerando parámetros del tratamiento térmico aplicado en aceros de baja aleación y Yong Liu, Zhu, y Cao (2017) en aceros herramientales para trabajo en caliente.

Con el empleo de RNA es garantizada una correlación precisa entre la microestructura y las propiedades mecánicas de la aleación Ti-6Al-4V por Y. Sun et al. (2011), quienes plantean que se puede utilizar de manera efectiva y extensiva para otros metales y aleaciones, destacando su utilidad en la correlación de variables altamente no lineales. También existen otros enfoques basados en la metalografía como plantean Paulic et al. (2015) quienes entrenan una RNA que a partir de un algoritmo de reconocimiento de características en imágenes metalográficas consigue realizar estimaciones de propiedades mecánicas.

En el caso de Jung et al. (2020), las entradas a la RNA son las fracciones volumétricas de cada microestructura presente en aceros bainíticos de alta resistencia. Esto resulta potencialmente útil para realizar optimizaciones. El modelo de Narayana et al. (2020)

basado en RNA resulta superior a modelos predecesores para predecir propiedades mecánicas de acero inoxidable austenítico a partir de la composición química y la temperatura de trabajo. Son detectados otros estudios novedosos con puntos de contacto como el de Xie et al. (2021), en este caso para planchas de cinco marcas de acero laminado en caliente.

Como análisis inverso a los casos anteriormente expuestos, o sea modelar la microestructura del material para garantizar determinada propiedad centran sus esfuerzos Z.-L. Wang y Adachi (2019). Las herramientas de aprendizaje automático en este sentido aún necesitan progresar, pero es un campo de sumo interés ingenieril (Juan, Dai, Yang, y Zhang, 2021). Para aleaciones con tamaño de grano ultra fino también ha sido demostrada la utilidad de las RNA por Du, Feng, y Zhang (2021) contando como variables de entrada la composición química del material.

En el estudio de Peet et al. (2011) ha sido obtenido un modelo de conductividad térmica en función de la temperatura y la composición del acero utilizando RNA basada en un marco estadístico bayesiano. El modelo permite la estimación de la conductividad para problemas de transferencia de calor, con incertidumbre adecuada. El desempeño del modelo se valida haciendo predicciones de resultados experimentales previos que no fueron incluidos en el proceso que lleva a la creación del mismo, por lo que resulta una de las bases de la presente investigación. En él no se abordan otras propiedades que sí son abordadas aquí.

Evidentemente la estrategia de modelar propiedades empleando RNA usando como variables de entrada la composición química de la aleación, la temperatura de trabajo y los parámetros de fabricación ofrece buenos resultados y ha sido frecuentemente

empleada por investigadores. A pesar de que existen varios sistemas de análisis computacional basados en métodos de aprendizaje automático para el análisis de datos industriales del acero, su aplicación continúa limitada por la extensibilidad de una estrategia de regresión, ya que es difícil obtener un modelo de predicción para múltiples tipos de aceros (H. Li et al., 2022).

1.4 Método Flash Láser.

El método flash laser (MFL) ha sido desarrollado por Parker, Jenkins, Butler, y Abbott (1961). Es un procedimiento experimental para la determinación de propiedades termo físicas de materiales. La difusividad térmica, propiedad inferida con este método es relativamente cercana a la conductividad térmica (Lunev, Zborovskii, Aliev, Heymer, y Vilkhivskaya, 2020).

El MFL es la técnica más empleada para realizar mediciones de difusividad térmica en sólidos debido a que el tiempo que demora realizar el experimento es corto, el rango de temperaturas es amplio y solo se requiere de una pequeña muestra del material. Consiste en someter una muestra de sólido a un pulso de energía radiante sobre una de sus caras suministrando calor, registrando el aumento de temperatura en la cara opuesta (Carr, 2019). En la figura 1.2 es presentado el principio de funcionamiento del MFL.

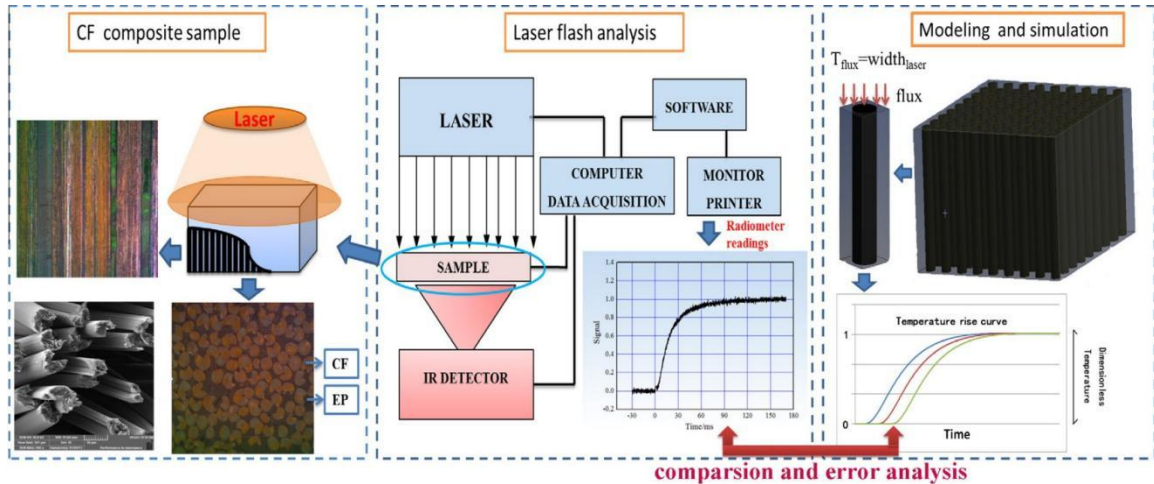


Figura 1.2 Principio de funcionamiento del MFL. Fuente: (N. Hu et al., 2015)

1.5 Determinación de la incertidumbre

La incertidumbre de un modelo indica la falta de certeza o precisión en los resultados o predicciones generadas por dicho modelo. Es una medida de la variabilidad o imprecisión asociada con las estimaciones del modelo. Puede ser causada por varios factores, como el error en los datos utilizados para construir el modelo, la simplicidad o complejidad del modelo, suposiciones inexactas o simplificadoras utilizadas en el proceso de modelado, así como la sensibilidad de los resultados a diferentes elecciones o condiciones (J. Miranda, 2001).

Según las especificidades del caso de estudio se seleccionan diversas métricas para cuantificar la incertidumbre de un modelo, algunas ampliamente empleadas por los autores son:

Error absoluto medio (MAE): Calcula el promedio de la diferencia absoluta entre los valores predichos y los valores reales. Un MAE más alto indica mayor incertidumbre.

Raíz del error cuadrático medio (RMSE): Es la raíz cuadrada del promedio de los

errores al cuadrado entre los valores predichos y los valores reales y se utiliza para obtener una medida en la misma escala que los valores originales. Un RMSE más alto indica mayor incertidumbre (W. Wang y Lu, 2018).

Coeficiente de determinación (R^2): Mide la proporción de la varianza en los datos de respuesta que es predecible a partir del modelo. Se encuentra entre cero y uno, un R^2 más bajo indica mayor incertidumbre, ya que el modelo no explica bien la variabilidad en los datos (Palma, 2022).

Intervalo de confianza: Es un rango que proporciona una estimación de la incertidumbre alrededor de la predicción del modelo. Cuanto más amplio sea el intervalo de confianza, mayor será la incertidumbre asociada con la predicción (Arriola y Hyman, 2009).

Estas métricas pueden variar dependiendo del tipo de problema y modelo utilizado. Se recomienda realizar análisis gráficos adicionales para comprender mejor la incertidumbre del modelo, como diagramas de dispersión, gráficos de residuos y gráficos de predicción (L. Chen, Wu, Hong, Zhang, y Wang, 2020).

En esta investigación se emplean RMSE, MAE, R^2 y se realizan análisis de gráficos de residuos y de predicción para realizar comparaciones entre los modelos obtenidos y los modelos registrados en la bibliografía al ser las métricas más frecuentes detectadas para este fin.

1.6 Conclusiones parciales del capítulo

Una vez finalizado el presente capítulo, se ha podido arribar a las siguientes conclusiones parciales:

1. Se reportan numerosos estudios centrados en la modelación de propiedades termofísicas, pero en todos los casos consultados y disponibles, los autores centran sus investigaciones en un estrecho rango de materiales, temperatura o propiedades.
2. Se reportan buenos resultados con el empleo de técnicas de inteligencia artificial empleando como variables de entrada la composición química y la temperatura para predecir propiedades mecánicas, tecnológicas y termofísicas, aunque solo están entrenados para pequeños grupos de materiales.
3. El procedimiento de mediciones de propiedades termofísicas MFL resulta el más empleado en la actualidad, presenta importantes ventajas como la rapidez con la que se realiza la medición y la pequeña muestra de material necesaria.

CAPÍTULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS

En el capítulo anterior se presentaron las investigaciones más relevantes sobre la modelación de propiedades termofísicas de aceros, se destacaron las limitaciones en ellas para relacionar la composición química de la aleación y la temperatura de trabajo con las propiedades objetivo. También se detalló la influencia en la microestructura de los aceros de la composición química y la temperatura. De acuerdo a lo anteriormente planteado, el objetivo fundamental del siguiente capítulo, consiste en obtener modelos empíricos que permitan predecir las propiedades termofísicas estudiadas para el grupo de aceros, con un nivel de incertidumbre menor a los modelos que se encuentran en la bibliografía consultada y disponible.

2.1 Descripción de los experimentos

2.1.1 Datos experimentales empleados

Se ha contado con una base de datos experimental obtenida gracias a la colaboración con investigadores del Departamento de Ingeniería Mecánica de la Escuela de Ingeniería y Ciencias Aplicadas de Bakú, Azerbaiyán (Anexo 1), donde también son detallados los principales datos técnicos del equipamiento empleado para las mediciones. Dicha base de datos es resultado de mediciones realizadas a 32 marcas de acero comercial AISI-SAE, obtenidas por laminado y luego recocidas.

Para cada una de las 32 marcas de aceros han sido seleccionadas cuatro muestras con diferentes composiciones químicas certificadas por el proveedor (ACEROS YIOLDIO), conociendo el porcentaje másico (w%) de los elementos C, Mn, P, S, Si, Ni, Cr, Mo y V

dentro de los límites permisibles según AISI-SAE. Han sido estudiadas las propiedades (λ , C_p , α , ρ) en el rango de 0-800°C. Las mediciones se han realizado a 0, 100, 200, 300, 400, 600 y 800°C.

El salto de 600-800°C es debido a las diferencias microestructurales presentes entre una marca de acero y otra para la zona correspondiente del diagrama Fe-C, provocadas por la influencia de los elementos aleantes, sean estabilizadores de ferrita o austenita. Estas diferencias en la zona de 600 a 800 °C provocan notables cambios en la temperatura a la que ocurren las reacciones invariantes en el material. Como se pretende obtener un modelo funcional para toda la gama de aceros disponible de la data el hecho de introducir las mediciones en el rango mencionado disminuiría la capacidad predictiva de los modelos.

2.1.2 Materiales estudiados

En la tabla 2.1 son presentados los aceros estudiados agrupados convenientemente de acuerdo a su tipo según la marcación AISI-SAE; en ella se aprecia que la mayor cantidad de aceros estudiados está concentrada en cuatro grupos: acero al carbono sin aleación (Mn 1.00% máx.), aceros al cromo-níquel (austenítico), aceros al cromo (ferrítico) y aceros al níquel-cromo-molibdeno. La descripción estadística de la data es presentada totalmente en el anexo 2.

Tabla 2.1 Aceros Estudiados

<i>Designación AISI-SAE</i>	<i>Tipo de acero</i>
1008, 1030, 1045, 1078, 1095	Acero al carbono sin aleación (Mn 1.00% máx.)
1145	Acero al carbono resulturizado

1345	Acero al manganeso
1524	Acero al carbono sin aleación (Max. Mn rango 1.00 a 1.65%)
2330, 2515	Aceros al níquel
301, 302, 304, 310, 316, 347	Aceros al cromo-níquel/Austenítico
4028	Aceros al molibdeno
405, 410, 420, 430	Aceros al cromo/Ferrítico
4130, 4140	Aceros al cromo-molibdeno
4320, 8115, 8617, 8650, 8822	Aceros al níquel-cromo-molibdeno
4626	Aceros al níquel-molibdeno
5132, 5140	Aceros al cromo
6150	Aceros al cromo-vanadio

A partir de los datos disponibles es definido el alcance de los posibles modelos predictivos de propiedades termofísicas solamente para aceros laminados y recocidos en el rango de temperaturas de 0 a 800°C y según la composición química de la aleación como es descrito en la tabla 2.2, por razones de espacio la totalidad de valores es presentada en el anexo 3.

Tabla 2.2. Alcance del modelo

<i>AISI-SAE</i>		<i>C</i>	<i>Mn</i>	<i>P</i>	<i>S</i>	<i>Si</i>	<i>Ni</i>	<i>Cr</i>	<i>Mo</i>	<i>V</i>
1008	min	0,06	0,25	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	0,1	0,5	0,04	0,05	0	0	0	0	0
...
5140	min	0,38	0,7	0,02	0,02	0,2	0	0,7	0	0
	max	0,43	0,9	0,04	0,04	0,35	0	0,9	0	0

2.2. Mediciones experimentales

Las mediciones se han realizado con equipamiento que basa su funcionamiento en el MFL. Ha sido usado el equipo ZT-Meter, modelo LZT con precisión de $\pm 4\%$ del fabricante LINSEIS. El procedimiento consiste en colocar la muestra en un porta muestras ubicado en una cámara aislada térmicamente. La cámara es mantenida a una temperatura predeterminada. A esta temperatura, la superficie de la muestra es irradiada con un pulso de energía programada.

El pulso de energía da como resultado un aumento homogéneo de temperatura en la superficie de la muestra, el aumento resultante en la superficie posterior de la muestra es medido por un sensor de radiación infrarroja de alta velocidad. La difusividad térmica es calculada a partir de los datos de aumento de temperatura frente al tiempo. La difusividad térmica, propiedad inferida con este método es relacionada con la conductividad térmica según se muestra en la ecuación (2.1)

$$\alpha = \lambda(C_p\rho)^{-1} \quad (2.1)$$

Donde: λ es la conductividad térmica, en $W/(m\cdot K)$, C_p es el calor específico en $J/(kg\cdot K)$, ρ es la densidad, en kg/m^3 .

Según especifica el fabricante del equipo la difusividad térmica es determinada a partir de la ecuación (2.2).

$$\alpha = 0,13879 L^2/t_{1/2} \quad (2.2)$$

Dónde: α es la difusividad térmica en m^2/s . L es el espesor de la muestra en m y $t_{1/2}$ es la mitad del tiempo del experimento en s .

A partir de una muestra de referencia se compara el aumento de temperatura con el fin de calcular el calor específico. El aumento de temperatura es obtenido a partir de la ecuación (2.3)

$$\Delta T = \frac{E}{m \cdot Cp} \quad (2.3)$$

Dónde: ΔT es el aumento de temperatura en K , E es la energía en J , m es la masa de la muestra en Kg y Cp es la capacidad calorífica en $J/kg \cdot K$

Al ser iguales la energía de la muestra y la referencia se puede calcular el calor específico mediante la siguiente relación (2.4):

$$Cp_{muestra} = \frac{Cp_{referencia} \cdot \Delta T_{referencia} \cdot m_{referencia}}{\Delta T_{muestra} \cdot m_{muestra}} \quad (2.4)$$

La densidad de la muestra se determina usando un densímetro DIL L75 Quattro del fabricante LINSEIS, posteriormente la conductividad térmica es despejada en la ecuación (2.1) quedando de la siguiente manera (2.5):

$$\lambda(T) = \alpha(T) \cdot Cp(T) \cdot \rho(T) \quad (2.5)$$

Dónde: ρ es la densidad de la muestra en kg/cm^3 .

Las mediciones se han realizado según la norma ASTM E1225-99 (ASTM, 2017)

El equipamiento utilizado el ilustrado en la figura 2.1.

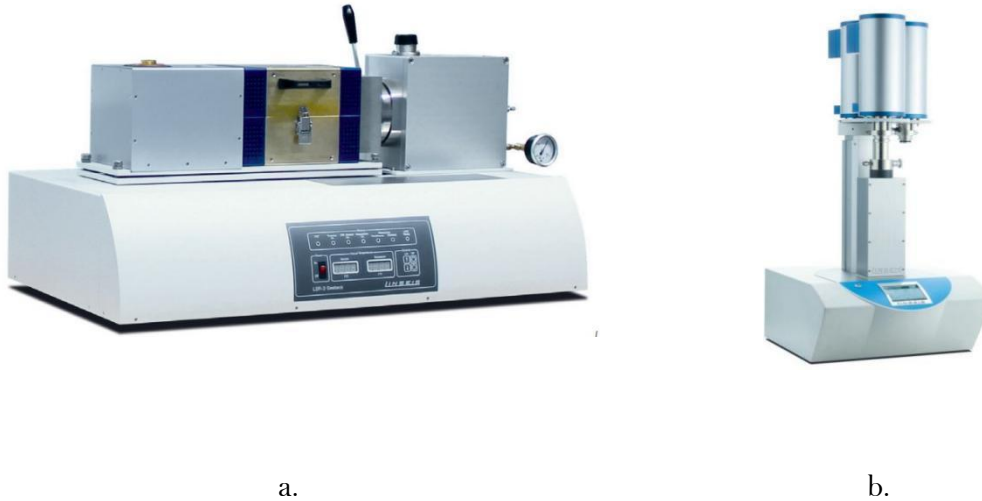


Figura 2.1. Equipamiento utilizado para las mediciones. a) LUT-METER. b) DIL L75

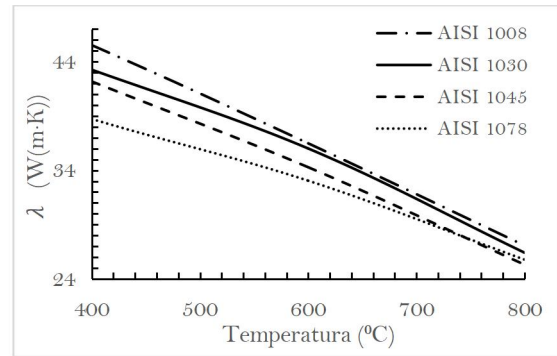
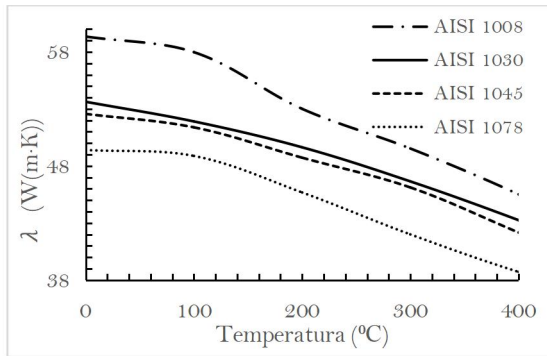
QUATTRO

2.2.1 Análisis de las mediciones

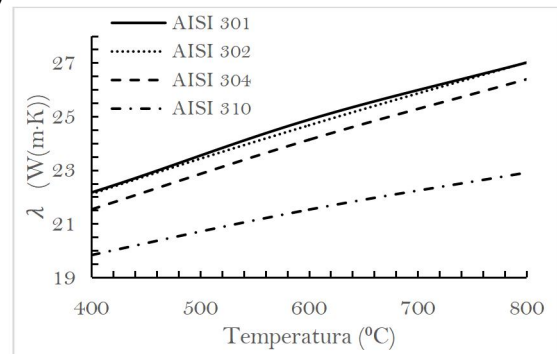
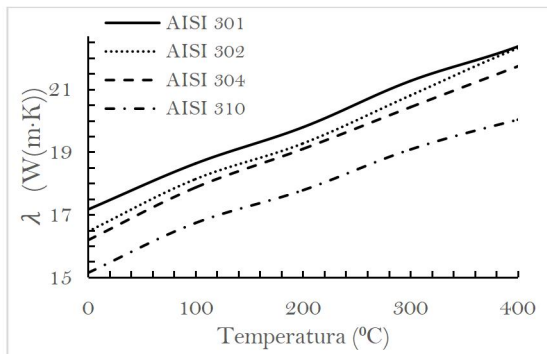
Las características propias de cada grupo de aceros declarado con anterioridad, dígame su composición química y por tanto la variación de sus propiedades en relación con sus modificaciones microestructurales en función del aumento de temperatura es estudiado en detalle y analizado de manera independiente.

En la figura 2.2 se representa gráficamente la evolución de la conductividad térmica para una selección de los aceros pertenecientes a los cuatro grupos declarados anteriormente respecto a la temperatura, de ella se infiere claramente que en el caso de los aceros perteneciente a los grupos 1 y 4 la tendencia de la conductividad térmica respecto a la

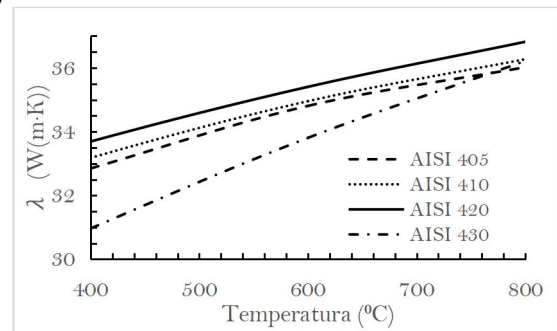
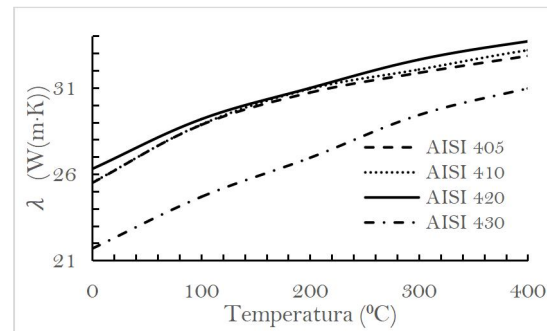
temperatura es a decrecer de forma relativamente constante. Para el grupo 1 los valores iniciales a 0 °C se encuentran entre 50 y 60 $W/(m \cdot K)$ y a 800 °C se encuentran entre 25 y 28 $W/(m \cdot K)$. El grupo 4 para 0 °C se encuentra entre 43 y 45 $W/(m \cdot K)$ y a 800 °C entre 29 y 30 $W/(m \cdot K)$. Sucede de forma inversa para los aceros de grupo 2 y 3, con clara tendencia al incremento. El grupo 2 a 0 °C presenta valores entre 15 y 17 $W/(m \cdot K)$ y a 800 °C se encuentran entre 22 y 26 $W/(m \cdot K)$, el grupo 3 a 0 °C se está entre 21 y 26 $W/(m \cdot K)$ y a 800 °C se encuentran entre 22 y 27 $W/(m \cdot K)$. El comportamiento inverso es ocasionado por el elevado por ciento de cromo presente en los grupos 2 y 3.



a)



b)



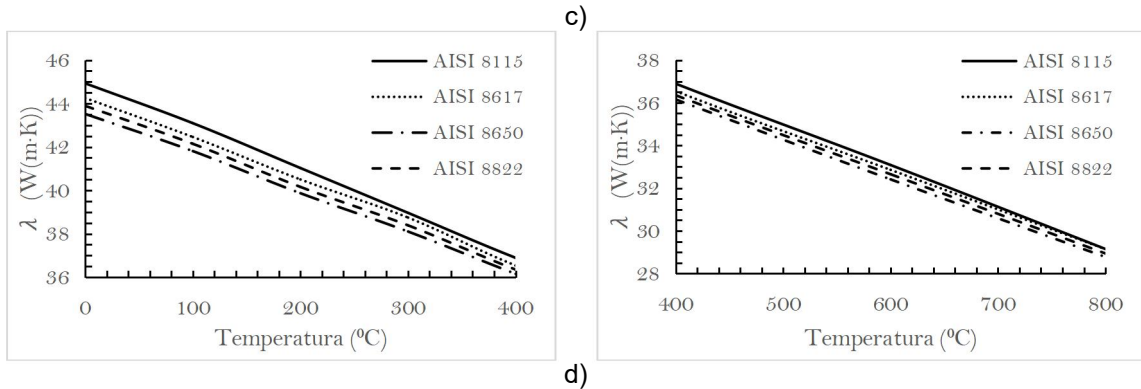
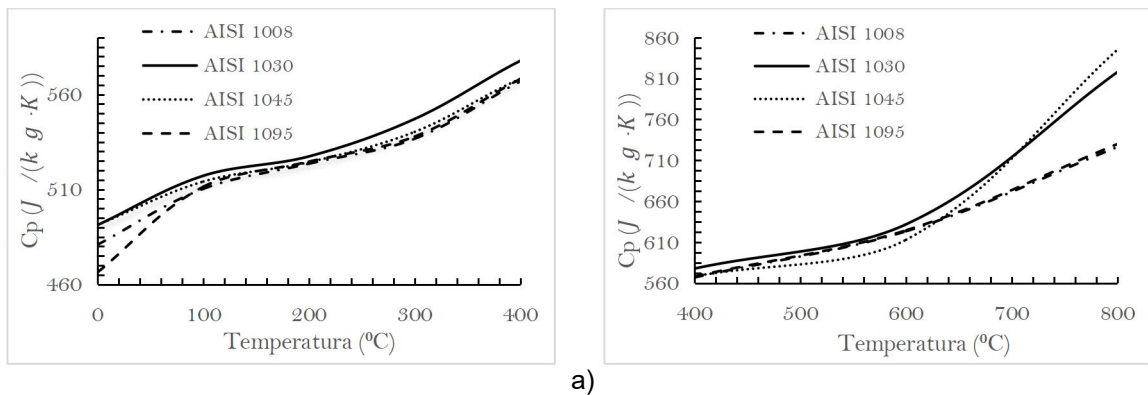


Figura 2.2 Evolución de la conductividad térmica respecto a la temperatura. a) Grupo 1, b) Grupo 2, c) Grupo 3, d) Grupo 4

En el caso del comportamiento del calor específico (figura 2.3) se observa una tendencia creciente para todo el intervalo de temperaturas, con un ligero aumento en la pendiente a partir de 600°C. En todos los materiales estudiados se registran valores a 0 °C entre 450 y 500 J/(kg · K) y a 800°C entre 650 y 730 J/(kg · K), exceptuando los aceros AISI 1030 y 1045, que para 800°C registran entre 820 y 850 J/(kg · K). El comportamiento medido se corresponde con valores reportados por otros autores (Norkett, Semple, Bechetti, Zhang, y Fisher, 2023)



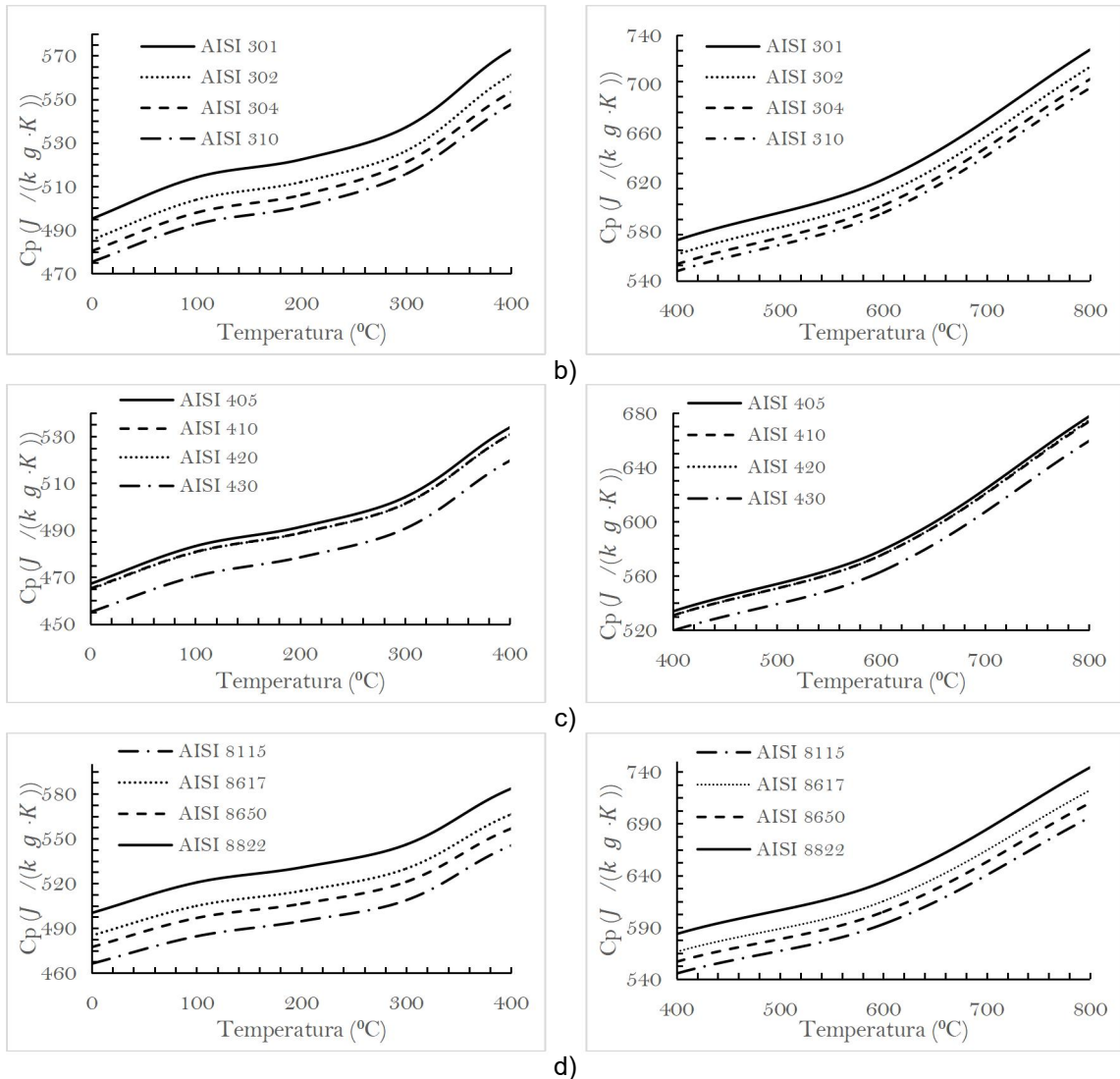
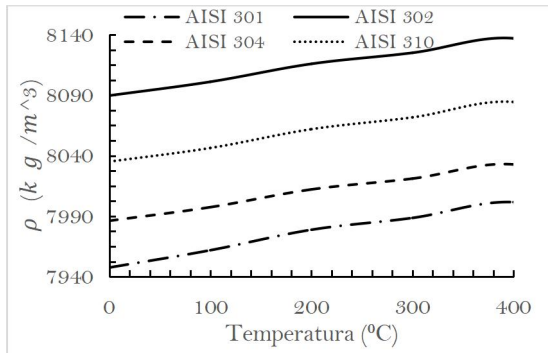
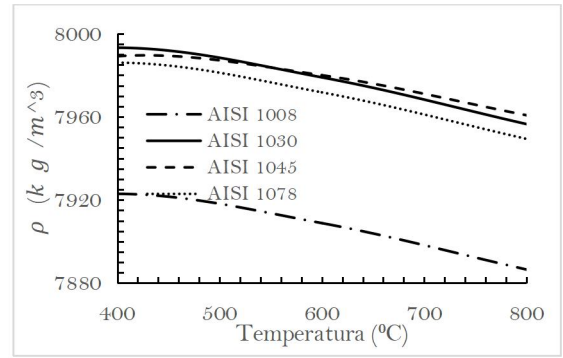
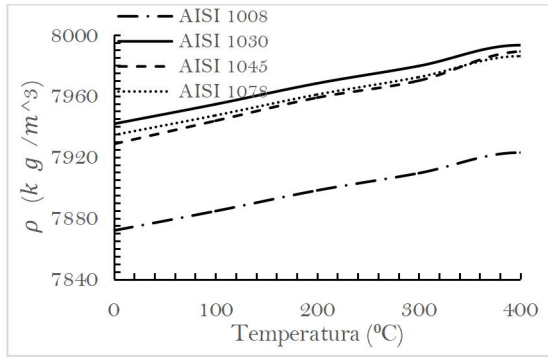
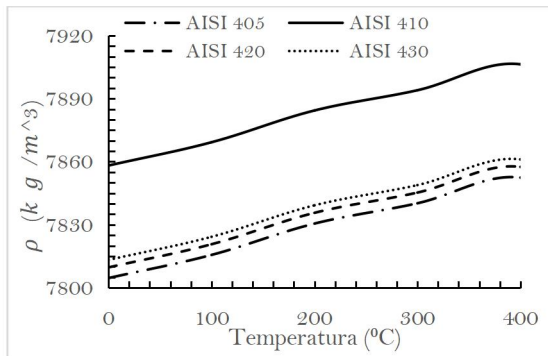
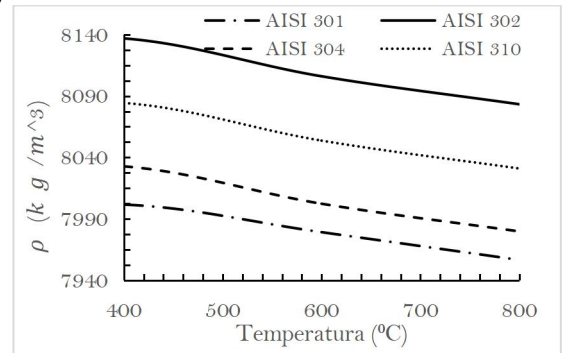


Figura 2.3 Evolución de calor específico respecto a la temperatura. a) Grupo 1, b) Grupo 2, c) Grupo 3, d) Grupo 4

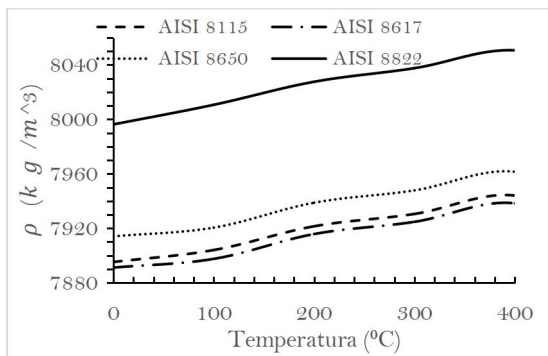
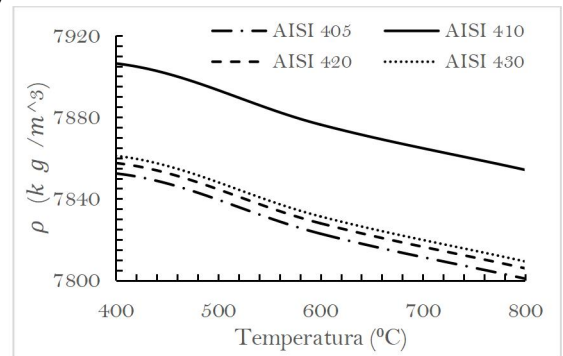
Los resultados de las mediciones de densidad (figura 2.4) presentan un comportamiento similar para los cuatro grupos de aceros que comienza en 0 °C entre 7800 y 7890 kg/m^3 , aumentando hasta 400 °C entre 40 y 50 kg/m^3 ; luego decrece hasta 800 °C, adoptando valores similares a los presentados con temperatura 0 °C. Un comportamiento similar está registrado en la bibliografía (Kalup, Beño, Zlá, y Drozdová, 2017; Kurgan, 2014).



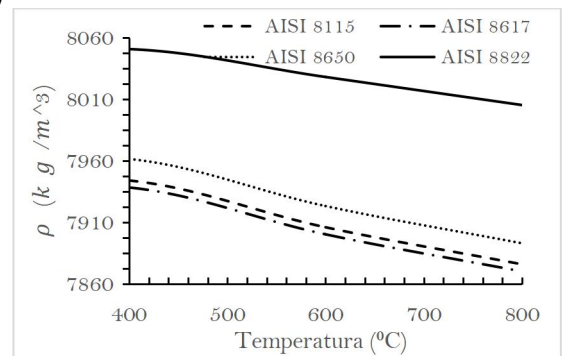
a)



b)



c)

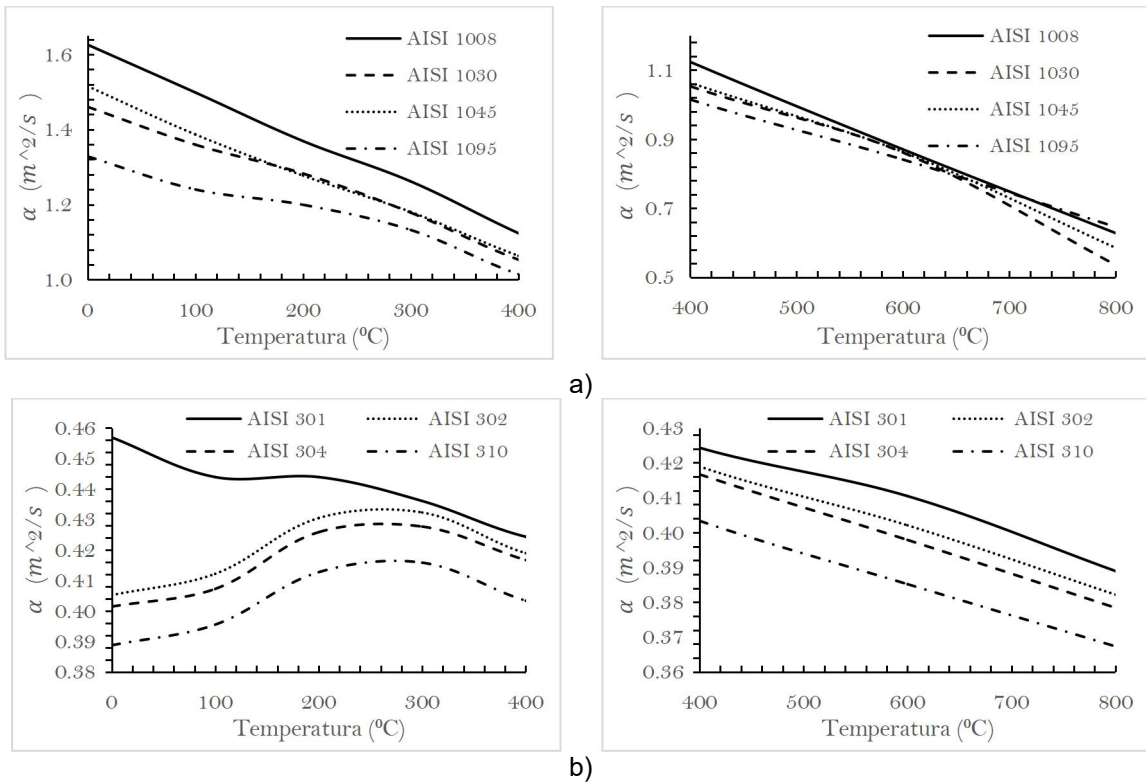


d)

Figura 2.4 Evolución de densidad respecto a la temperatura. a) Grupo 1, b) Grupo 2, c) Grupo

3, d) Grupo 4

El comportamiento de la difusividad en función de la temperatura (figura 2.5) difiere entre los grupos de aceros, siendo mayores las diferencias en el rango de 0 a 400°C. Para el grupo 1 es relativamente constante el decrecimiento en todo el rango de temperatura; comenzando entre 1,35 y 1,65 m^2/s a 0°C y entre 0,55 a 0,68 a 800°C. En el grupo 2 el rango de valores de difusividad, así como su pendiente difieren considerablemente entre los materiales que conforman el grupo hasta los 400 °C; no es así para temperaturas superiores hasta 800 °C. El comportamiento del grupo 3 es similar al del grupo 2. El grupo 4 se comporta de forma decreciente en todo el intervalo de temperaturas de forma constante, con valores a 0°C entre 1 y 1,25 m^2/s y a 800°C entre 0,4 y 0,5 m^2/s . Los resultados de las mediciones están en concordancia con los reportados por otros autores (Abas y Taieh, 2015; Ferreira-Oliveira et al., 2022).



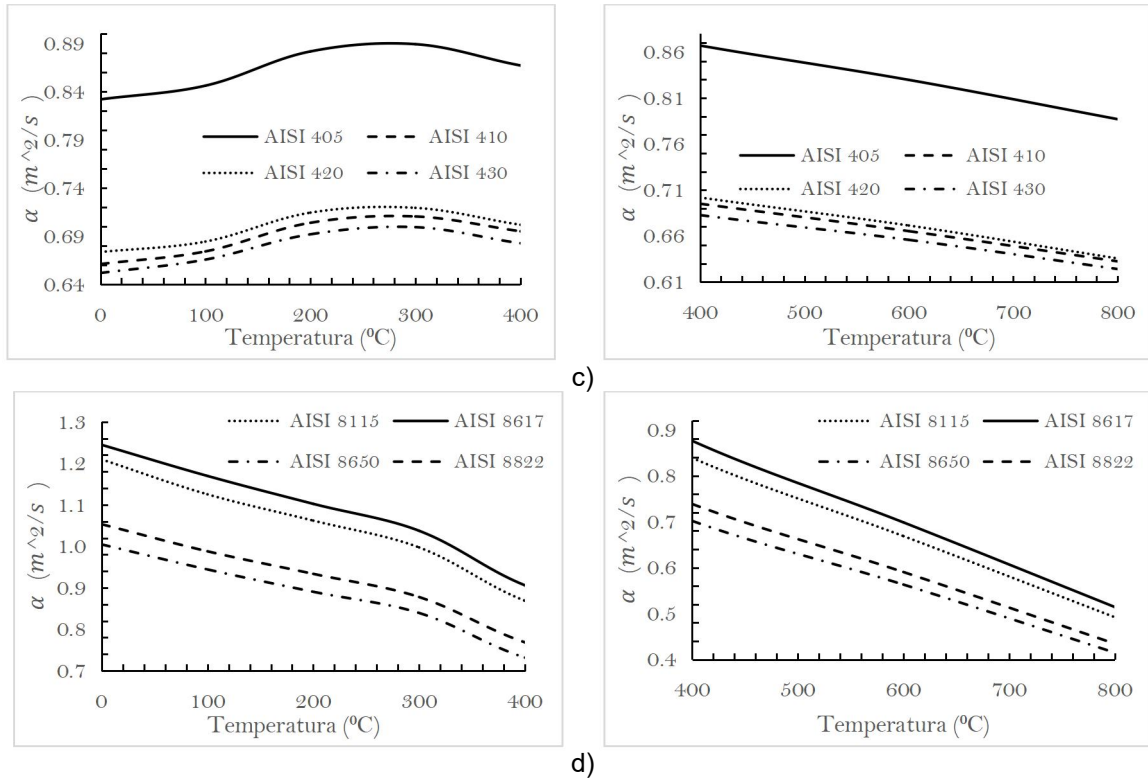


Figura 2.5 Evolución de difusividad respecto a la temperatura. a) Grupo 1, b) Grupo 2, c)

Grupo 3, d) Grupo 4

2.3 Métodos para el tratamiento y generalización de los datos experimentales

Para obtener los modelos predictivos de propiedades termofísicas no es recomendada la aplicación de una regresión lineal múltiple, ya que el supuesto de que exista relación lineal entre los predictores y la variable predicha no se cumple, por lo que queda descartado su empleo y se procede al uso de métodos con capacidad para correlacionar variables que presentan correspondencias altamente no lineales.

2.3.1 Ajuste progresivo de funciones

El Ajuste Progresivo de Funciones (APF) es un método residual que permite la convergencia de una correlación base a partir de correcciones realizadas por medio de

funciones lineales o polinomios (Bronshtein y Semendiaev, 1973) es una primera opción para la obtención de modelos.

2.3.2 K-vecino cercano

El algoritmo de aprendizaje automático K-Vecino Cercano (KNN por sus siglas en inglés) que está fundamentado en la idea de identificar observaciones en el conjunto de entrenamiento que se asemejen a la observación de prueba (observaciones vecinas) y asignarle como valor predicho la clase predominante entre dichas observaciones consigue resultados aceptables para diversas aplicaciones a pesar de su baja complejidad (Rodrigo, 2018). Se ha utilizado como segunda variante para la obtención de modelos.

2.3.3 Red Neuronal Artificial

Partiendo de los óptimos resultados en problemas de similar complejidad registrados en la bibliografía (Peet et al., 2011), es empleada una RNA, específicamente del tipo perceptrón multicapa (PMC). El PMC posibilita resolver problemas no lineales, tiene tolerancia a datos incompletos y al ruido. A diferencia de otros métodos de aprendizaje no supervisado el PCM emplea un conjunto de datos etiquetados para ajustar sus pesos y realizar predicciones, permitiendo un mayor control y dirección del proceso de aprendizaje. Su versatilidad y capacidad de aprendizaje lo convierten en una excelente herramienta para una gran variedad de aplicaciones.

2.4 Aplicación del APF

Para la aplicación del método APF son empleados los valores medios de composición química y propiedades de cada una de las marcas de acero AISI disponibles en la data, obtenidos según la ecuación (2.6). Estos valores son presentados en los anexos 4 y 5 respectivamente.

$$\bar{X}_{(T)} = \frac{1}{n} \sum X_{(T)} \quad (2.6)$$

Donde: $\bar{X}_{(T)}$ es el valor promedio de la variable para cada medición de temperatura T, $\sum X_{(T)}$ es la sumatoria de los valores experimentales disponibles de dicha variable en la temperatura T y n es el total de mediciones para cada acero estudiado a temperatura T.

Son calculados los factores R_1 y R_2 según las ecuaciones (2.7) y (2.8) respectivamente.

$$R_1 = \sqrt{C + Cr} \quad (2.7)$$

$$R_2 = \sqrt[4]{Mn + S + P + Si + Ni + Mo + V} \quad (2.8)$$

Dónde: C, Cr, Mn, S, P, Si, Ni, Mo y V corresponden a la composición química porcentual de los correspondientes elementos que así se nombran según la tabla periódica.

Se correlaciona la temperatura con la propiedad para cada medición por el método de mínimos cuadrados y es agregada una línea de tendencia de la forma $\bar{K}_{(T)} = bT + c$.

Para establecer la función base en la predicción de la propiedad, son correlacionados de forma individual los parámetros b y c con R_1 , ajustando una línea de tendencia (lineal o polinómica de orden dos según mejor sea el ajuste según R^2), obteniendo de las ecuaciones que las describen una primera aproximación para explicar la dependencia entre la composición química y la temperatura con la propiedad. Se presentan en el anexo 6 los valores de R_1 , b , c y el coeficiente de determinación R^2 de dicha correlación. En la tabla 2.3 son presentadas dichas ecuaciones para las propiedades estudiadas.

Tabla 2.3. Ecuaciones de primera aproximación

<i>Conductividad Térmica (W/m·K)</i>	<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>
$Y_1 = -0,002(R_1)^2 + 0,024(R_1) - 0,044$	$Y_1 = -0,001(R_1)^2 - 0,01(R_1) + 0,318$
$Y_2 = -8,775(R_1) + 56,681$	$Y_2 = 1,505(R_1) + 448,64$
<i>Densidad (kg/m³)</i>	<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>
$Y_1 = -0,001(R_1)^2 - 0,008(R_1) + 0,012$	$Y_1 = 0,005(R_1)^2 - 0,022(R_1) - 0,019$
$Y_2 = 14,981(R_1) + 7\,923,69$	$Y_2 = -7,14(R_1)^2 + 58,29(R_1) - 103,94$
	$Y_3 = -218,93(R_1)^2 - 10614,38(R_1) + 140\,847$

Donde: Y_1 corresponde a la línea de tendencia de R_1 Vs b y Y_2 corresponde a la línea de tendencia de R_1 Vs c

Se calcula la primera función base de APF como se muestra en la ecuación (2.9). Los valores obtenidos se presentan en el anexo 7.

$$\bar{K}_{(1)} = Y_1 \cdot T + Y_2 \quad (2.9)$$

Donde: $\bar{K}_{(1)}$ es el valor de la propiedad calculado por la primera aproximación de APF.

T es la temperatura, en °C.

Se realiza un segundo paso de ajuste, para ello es calculado el cociente $\bar{K}_{(2)}$ según la ecuación (2.10). Los valores obtenidos son presentados en el anexo 8.

$$\bar{K}_{(2)} = \bar{K}_{(T)}/\bar{K}_{(1)} \quad (2.10)$$

Se aplica el método de mínimos cuadrados para correlacionar los valores de temperatura con valores medidos de las propiedades para cada acero, pero esta vez de la forma $\bar{k}_{(T)} = dT^2 + eT + f$. En el anexo 9 son presentados los parámetros d , e y f , su correlación, así como los factores R_2 .

Se procede a correlacionar los valores de los parámetros d , e y f con el factor R_2 respectivamente para definir la primera corrección. Partiendo de la ecuación que describe la tendencia en los gráficos de dispersión se escriben las ecuaciones mostradas en la tabla 2.4.

Tabla 2.4. Ecuaciones de segunda aproximación

<i>Conductividad Térmica (W/m·K)</i>	<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>
$Y3 = 0,006(R_2) - 0,008$ $Y4 = -7,101(R_2)^2 + 15,183(R_2) - 6,614$ $Y5 = 2933,311(R_2)^2 - 9577,043(R_2) + 16860,307$	$Y3 = 0,005(R_2)^2 - 0,017(R_2) + 0,019$ $Y4 = -2,405(R_2)^2 + 8,64(R_2) - 11,571$ $Y5 = 1153,345(R_2)^2 - 3543,8(R_2) + 13068,5$
<i>Densidad (kg/m³)</i>	<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>
$Y3 = -0,0002(R_2) - 0,0002$ $Y4 = 0,003(R_2)^2 + 0,0002(R_2) + 0,26$ $Y5 = 120,88(R_2)^2 - 178,48(R_2) + 9987,97$	$Y3 = 0,0065(R_2)^2 - 0,0072(R_2) - 0,0036$ $Y4 = -10,23(R_2)^2 + 15,98(R_2) - 4,51$ $Y5 = 2807,3(R_2)^2 - 10196,63(R_2) + 17699,5$

Donde: Y_3 corresponde a la línea de tendencia de R_2 vs d , Y_4 corresponde a la línea de tendencia de R_2 vs e y Y_5 corresponde a la línea de tendencia de R_2 vs f

Por último se presenta la ecuación (2.11), con ella se estiman los valores de cada propiedad en el rango de 0-800°C para las marcas de acero estudiadas.

$$\bar{K}_{(3)} = [Y_3 \cdot T^2 + Y_4 \cdot T + Y_5] \bar{K}_{(2)} \quad (2.11)$$

Donde: $\bar{K}_{(3)}$ es el valor de la propiedad obtenido con el modelo de APF

En el anexo 10 se presentan los valores de $\bar{K}_{(3)}$ obtenidos para cada propiedad y en el anexo 11 la incertidumbre de estos con respecto al valor medio experimental. En el anexo 12 se resume el código ejecutado en Matlab R2018a para aplicar el APF.

Se calculan RMSE según la ecuación (2.13), MAE según la ecuación (2.14), R^2 según la ecuación (2.15); con el objetivo de realizar posteriores análisis comparativos sobre la incertidumbre de los modelos.

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{i=n} (Y_{real} - Y_{pre})^2}{N}} \quad (2.13)$$

Dónde: Y_{real} es el valor experimental de la propiedad, Y_{pre} es el valor predicho de la propiedad y N es la cantidad de puntos del conjunto.

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} |Y_{real} - Y_{pre}|}{N} \quad (2.14)$$

(2.15)

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^{i=n} (Y_{pred} - Y_{med})^2}{\sum_{i=1}^{i=n} (Y_{real} - Y_{med})^2}$$

Dónde: Y_{med} es el valor medio de la propiedad

En la tabla 2.5 se han resumido las métricas de interés obtenidas con los modelos a partir de aplicar el método de APF, así como las métricas para los principales grupos de marcas en la tabla 2.6 y la variación de RMSE con el aumento de la temperatura en la figura 2.6

Tabla 2.5 Métricas para el modelo APF con toda la data.

<i>Conductividad Térmica (W(m·K))</i>			<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>		
<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
6,26	3,68	0,98	39,41	5,03	0,80
<i>Densidad (kg/m³)</i>			<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>		
<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
96,69	8,89	0,27	0,16	0,35	0,73

En la tabla 2.5 se aprecia que en el APF para el caso de la densidad el valor de R^2 indica que el modelo no explica correctamente la variabilidad de los datos, y que para las otras propiedades presenta valores superiores a 0,7, indicando que el modelo si explica la variabilidad de los datos.

Tabla 2.6 Métricas para el modelo APF para los grupos.

<i>Conductividad Térmica (W(m·K))</i>				<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>			
<i>Grupo</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>Grupo</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
1	2,36	1,39	0,95	1	39,66	5,13	0,87
2	2,53	1,48	0,93	2	19,71	4,15	0,93
3	3,05	1,57	0,92	3	21,62	4,35	0,99
4	2,59	1,50	0,94	4	22,18	3,97	0,93
<i>Densidad (kg/m³)</i>				<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>			
<i>Grupo</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>Grupo</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
1	68,75	7,91	0,11	1	0,12	0,31	0,84
2	101,57	9,19	0,46	2	0,20	0,37	0,20
3	127,26	11,17	0,35	3	0,13	0,33	0,23
4	56,11	6,52	0,28	4	0,10	0,28	0,89

En la tabla 2.6 se analiza que para la conductividad térmica las métricas RMSE y MAE son menores al emplear los datos de los grupos para obtener el modelo, indicando menor incertidumbre, a pesar de que R² resulta menor. El calor específico para los grupos 2, 3 y 4 presenta menores RMSE y MAE y mayor R², indicando menor incertidumbre, contrario a lo que sucede en el grupo 1. Para la densidad los grupos 1 y 4 presentan menor incertidumbre; 2 y 3 resultan con mayor incertidumbre. En la difusividad los grupos 1, 3 y 4 tienen menor incertidumbre; el grupo 2 es mayor.

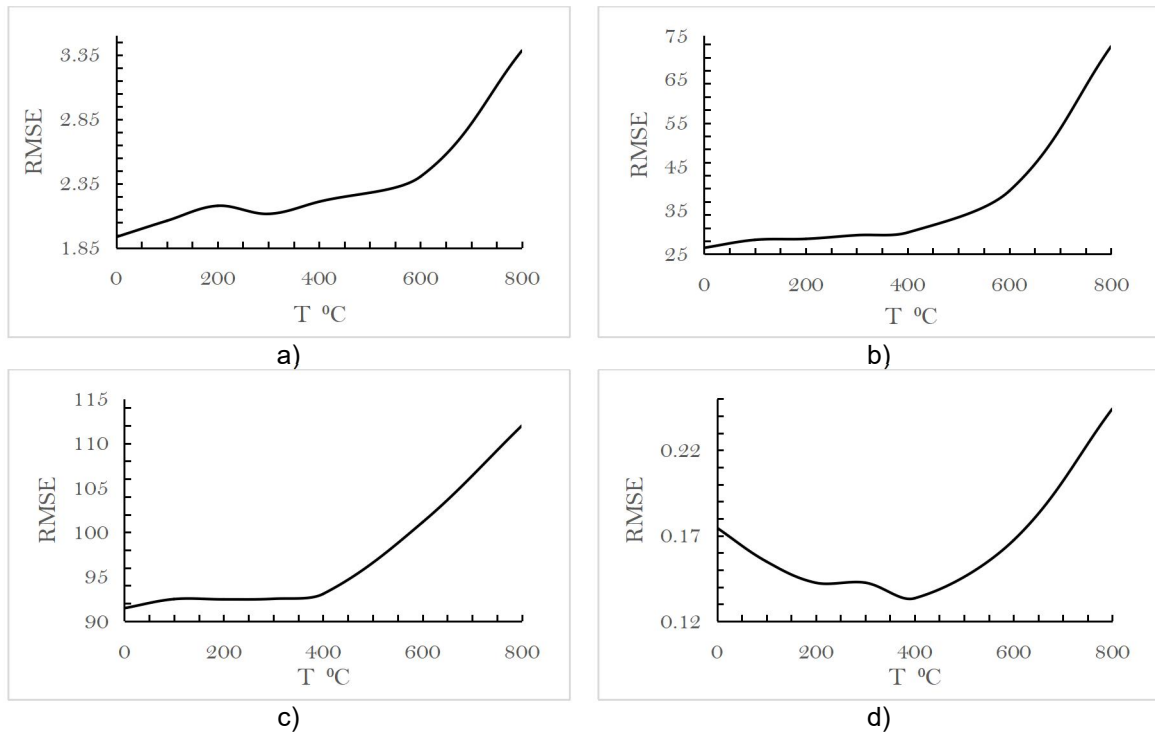


Figura 2.6. Variación de RMSE con la temperatura. a) Conductividad térmica, b) Calor específico, c) Densidad, d) Difusividad

Se observa en la figura 2.6 que el modelo presenta menor incertidumbre para temperaturas menores a 400 °C y que a partir de esta temperatura la incertidumbre aumenta considerablemente. Este comportamiento indica que el APF es inadecuado para temperaturas superiores a 400°C.

2.5 Preprocesamiento de los datos experimentales

Para proceder a implementar métodos de aprendizaje automático es imprescindible realizar el preprocesamiento de los datos disponibles. Primeramente, se realiza una exploración descriptiva de la data. Se verifica que el almacenamiento de cada variable se corresponde con el tipo de valor correcto, comprobando que las variables correspondientes a la composición química y a las propiedades del tipo doble o números

reales y la variable temperatura del tipo entero. Se comprueba si existen filas incompletas, al detectar que no es el caso, la data está completa, no existen campos vacíos.

Para garantizar que no existe alta correlación entre ninguna de las variables predictoras, lo que podría añadir información redundante al modelo, se calcula el coeficiente de correlación de Pearson, para cada uno de los pares posibles de variables predictoras, comprobándose que no supera en ninguno de los casos el valor de 0,8, por lo que queda comprobado que no existe alta relación lineal entre predictores.

Se realiza un filtrado por varianza para eliminar predictores no informativos. Se comprueba si existen predictores con varianza cero o muy próxima a cero, en este último caso incurre el predictor V (correspondiente a la composición másica de vanadio en la aleación), por lo que se elimina del modelo.

Con el objetivo de que todos los predictores tengan una media cero se resta a cada valor la media del predictor al que pertenece, esta técnica es conocida como centrado. Se realiza el normalizado de los datos, ya que la escala de los mismos originalmente es considerablemente diferente, para ello se transforman los datos de manera que estén en el rango de cero a uno, se emplea la ecuación (2.16).

$$X' = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \quad (2.16)$$

Dónde: X' es el valor normalizado, X es el valor real, X_{min} es el valor mínimo de la variable en cuestión y X_{max} el valor máximo.

Se dividen los datos en un subconjunto con el 80% del total de datos disponibles seleccionados de forma aleatoria con el fin de entrenar el modelo, el restante 20% se conserva en otro subconjunto que será empleado para probar la capacidad predictora del mismo. Mediante funciones establecidas en la elaboración del código se garantiza que la variable de respuesta en ambos conjuntos tenga una distribución similar.

2.6 Aplicación del KNN

Para incrementar el ajuste del modelo se detectan los datos extremos creando un gráfico de caja y considerando que todos los valores inferiores a la línea del primer cuartil y superiores a la línea del tercer cuartil serán eliminados, reduciendo el conjunto de entrenamiento a un 70% de su tamaño inicial.

Para la optimización del modelo obtenido a partir de KNN se realiza una búsqueda de malla para determinar el número de observaciones vecinas (k) que deberá contemplarse para la estimación. Para ello se entrena el modelo para valores de k de 1 a 10. Se implementa una validación cruzada en la que se toma un 10% del subconjunto de entrenamiento como subconjunto de validación y esto a su vez se repite en cinco ocasiones, garantizando la convergencia de los modelos.

El procedimiento se realiza para la totalidad de la data, los valores óptimos de k para cada propiedad se presentan en la tabla 2.7. La evolución de los modelos se grafica en la figura 2.7. El código implementado en el software RStudio se resume en el anexo 13.

Tabla 2.7 Hiperparámetros óptimos del modelo KNN para toda la data.

<i>Conductividad Térmica ($W/(m\cdot K)$)</i>	<i>Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)</i>
--	--

k	$RMSE$	MAE	R^2	k	$RMSE$	MAE	R^2
6	1,65	1,31	0,98	6	3,93	3,23	0,99
<i>Densidad (kg/m³)</i>				<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>			
k	$RMSE$	MAE	R^2	k	$RMSE$	MAE	R^2
1	7,47	3,57	0,99	5	0,034	0,026	0,98

Según los valores de R^2 en la tabla 2.7 se puede afirmar que para todas las propiedades estudiadas, el modelo KNN explica correctamente la variabilidad de los datos.

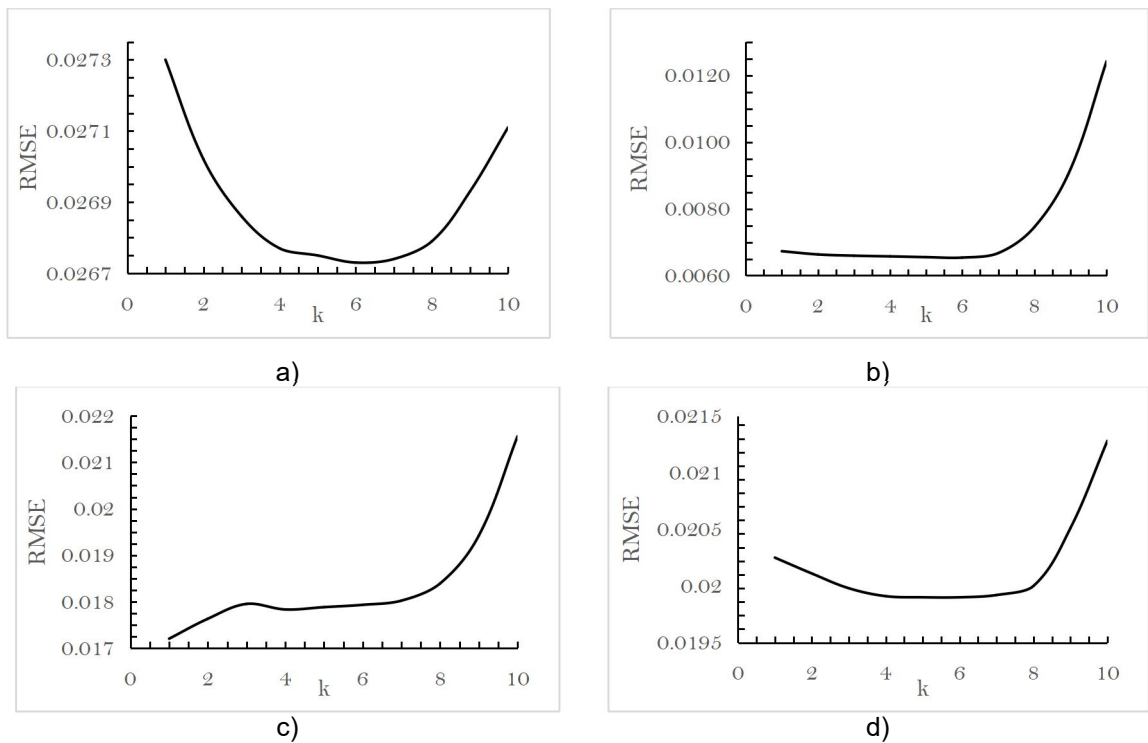


Figura 2.7. Evolución de los modelos KNN. a) Conductividad térmica, b) Calor específico, c) Densidad, d) Difusividad

También se entrena el modelo para el caso particular de los cuatro grandes grupos de marcas disponibles en la data y declarados anteriormente en el capítulo. Los resultados de las optimizaciones de los modelos se resumen en la tabla 2.8.

Tabla 2.8 Hiperparámetros óptimos del modelo KNN para los grupos.

<i>Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)</i>					<i>Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)</i>				
<i>Grupo</i>	<i>k</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>Grupo</i>	<i>k</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
1	8	3,57	3,02	0,97	1	6	4,17	3,50	0,97
2	10	0,80	0,65	0,93	2	7	4,07	3,28	0,99
3	8	1,31	1,08	0,89	3	8	4,00	3,27	0,98
4	6	1,59	1,32	0,97	4	4	4,49	3,43	0,99
<i>Densidad (kg/m^3)</i>					<i>Difusividad ($(m^2/s)10^{-5}$)</i>				
<i>Grupo</i>	<i>k</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>Grupo</i>	<i>k</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
1	6	3,57	3,02	0,97	1	5	0,041	0,032	0,98
2	3	15,9	6,31	0,94	2	9	0,015	0,012	0,86
3	9	3,66	3,06	0,97	3	8	0,027	0,022	0,91
4	4	3,63	3,007	0,99	4	5	0,032	0,026	0,97

Según lo expuesto en la tabla 2.8 se resume sobre el comportamiento de la incertidumbre de los grupos de aceros respecto al modelo general que para el caso de la conductividad térmica los modelos para los grupos 2, 3 y 4 presentan menor incertidumbre, no así el grupo 1. Ninguno de los grupos presenta menor incertidumbre para el calor específico. Solamente el grupo 2 no tiene menor incertidumbre en la densidad. En la difusividad, excepto el grupo 1, todos tienen menor incertidumbre.

Por su interés para la investigación se representa gráficamente la variación de RMSE con el aumento de temperatura para cada propiedad en la figura 2.8; donde se aprecia que, a diferencia de lo que ocurre en APF, el comportamiento de la incertidumbre con el aumento de la temperatura es diferente para cada una de las propiedades.

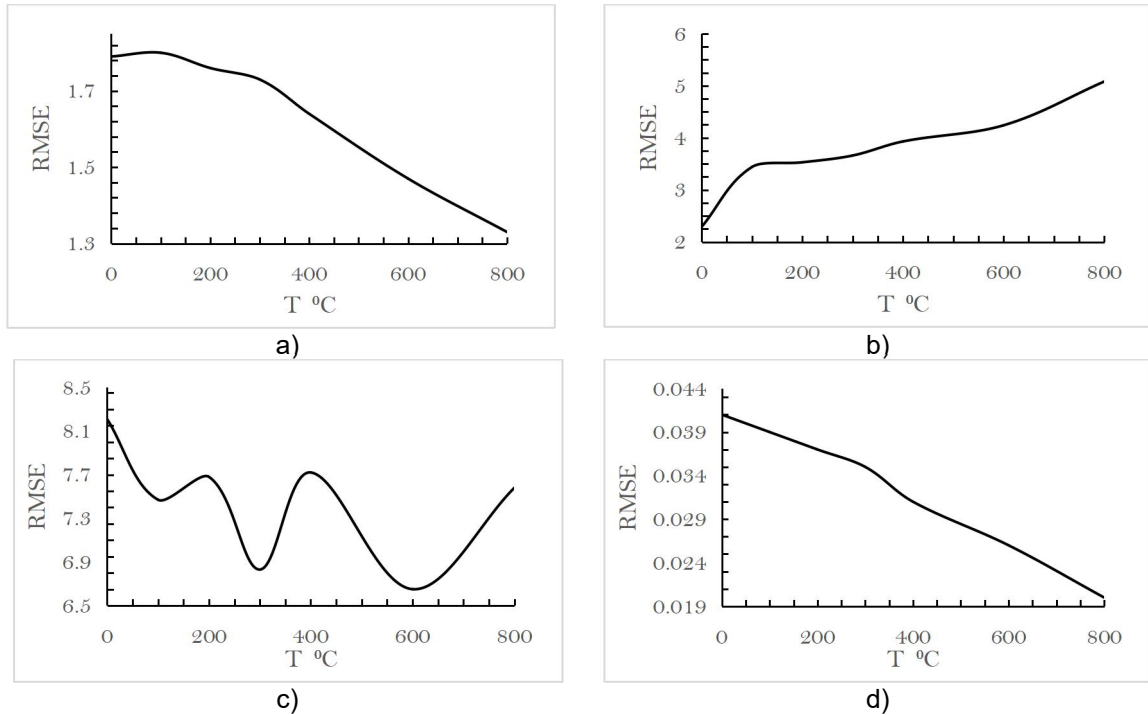


Figura 2.8. Variación de RMSE con la temperatura. a) Conductividad térmica, b) Calor específico, c) Densidad, d) Difusividad

2.7 Aplicación de RNA

Se entrena una RNA del tipo perceptrón multicapa con una capa oculta (figura 2.9) para la cual son optimizados los hiperparámetros correspondientes al número de neuronas en la capa oculta (n) (25, 30, 35) y a la regularización (*decay*) (0,001; 0,1; 0,5). Se lleva a cabo una búsqueda de malla para optimizar dichos hiperparámetros. Se ejecuta una validación cruzada con subconjuntos de validación de 10% y cinco repeticiones para garantizar tanto la convergencia del modelo como la optimización de hiperparámetros, similar a lo realizado en KNN.

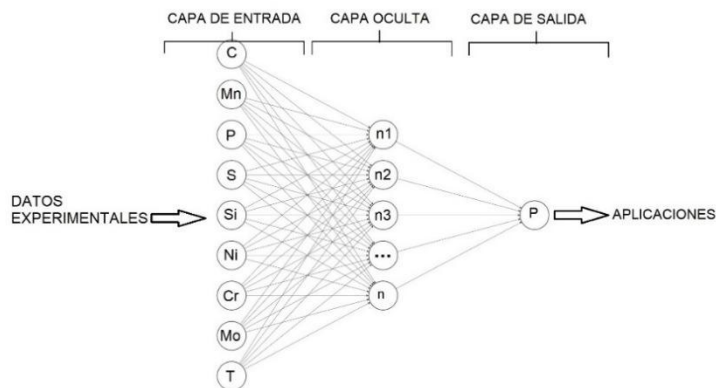


Figura 2.9. Arquitectura de la RNA

Los valores óptimos de cada hiperparámetro para cada propiedad se resumen en la tabla 2.9, donde según los valores de R^2 se explica correctamente la variabilidad de los datos. La evolución de los modelos es graficada en la figura 2.10. El código implementado en el software RStudio se resume en el anexo 14.

Tabla 2.9. Hiperparámetros óptimos del modelo RNA para toda la data.

Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)					Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)				
n	Decay	RMSE	MAE	R^2	n	Decay	RMSE	MAE	R^2
35	0,001	2,12	1,63	0,97	25	0,001	19,65	14,23	0,94
Densidad (kg/m^3)					Difusividad ($(m^2/s)10^{-5}$)				
n	Decay	RMSE	MAE	R^2	n	Decay	RMSE	MAE	R^2
35	0,001	23,55	16,64	0,94	25	0,001	0,052	0,039	0,97

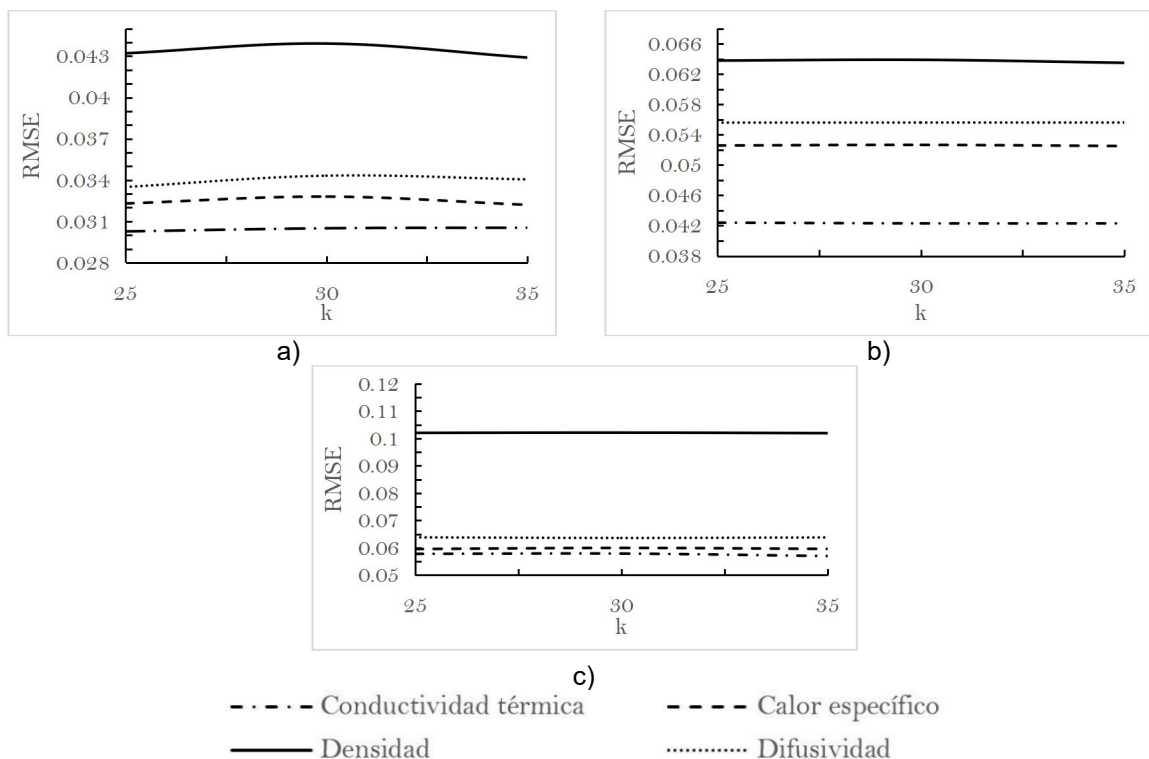


Figura 2.10. Evolución de los modelos RNA. a) Decay = 0,001; b) Decay = 0,1; c) Decay = 0,5

El resultado de la optimización para los cuatro mayores grupos de marcas de la data es resumido en la tabla 2.10. La variación de los valores de RMSE respecto al aumento de temperatura es apreciable en la figura 2.11.

Tabla 2.10. Hiperparámetros óptimos del modelo KNN para los grupos.

Conductividad térmica ($W/(m \cdot K)$)						Calor específico ($J/(kg \cdot K)$)					
Grupo	n	Decay	RMSE	MAE	R^2	Grupo	n	Decay	RMSE	MAE	R^2
1	30	0,001	2,22	1,84	0,96	1	35	0,001	3,86	3,19	0,96
2	25	0,001	0,82	0,67	0,91	2	25	0,001	17,89	9,31	0,92
3	25	0,001	1,32	1,08	0,89	3	25	0,001	3,86	3,16	0,96
4	30	0,001	1,61	1,33	0,96	4	25	0,001	4,44	3,58	0,99
Densidad (kg/m^3)						Difusividad ($(m^2/s)10^{-5}$)					

<i>Grupo</i>	<i>n</i>	<i>Decay</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>	<i>Grupo</i>	<i>n</i>	<i>Decay</i>	<i>RMSE</i>	<i>MAE</i>	<i>R²</i>
1	35	0,001	3,86	3,19	0,96	1	35	0,001	9,8	7,3	0,96
2	30	0,001	17,89	9,31	0,92	2	25	0,001	5,6	4,57	0,99
3	35	0,001	3,86	3,16	0,96	3	25	0,001	5,01	4,13	0,96
4	35	0,001	4,44	3,58	0,99	4	25	0,001	6,18	4,96	0,97

De la tabla 2.10 se concluye que para todos los casos, excepto el grupo 1 en la conductividad térmica, el modelo RNA ofrece menor incertidumbre cuando es entrenado de forma individual para cada grupo.

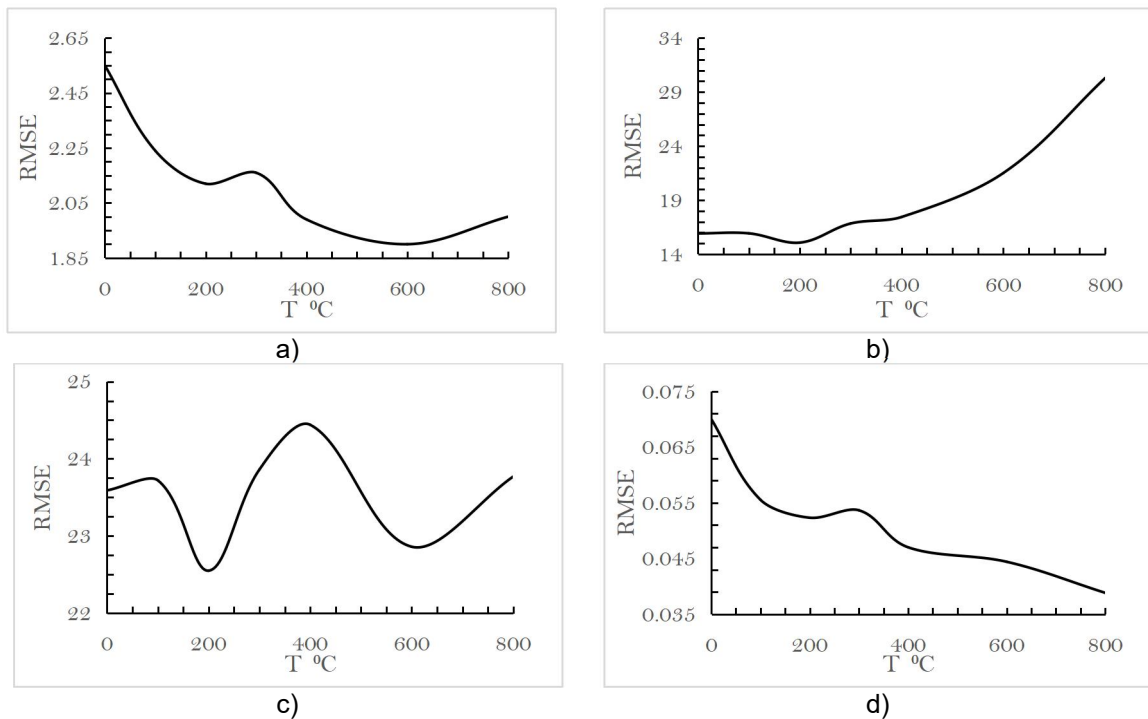


Figura 2.11. Variación de *RMSE* con la temperatura. a) *Conductividad térmica*, b) *Calor específico*, c) *Densidad*, d) *Difusividad*

En la figura 2.11 se aprecia un comportamiento similar al de la figura 2.8, correspondiente a KNN. Indicando la similitud de los resultados que ofrecen ambos métodos de aprendizaje automático.

2.8 Conclusiones parciales del capítulo

Una vez finalizado el presente capítulo, se ha podido arribar a las siguientes conclusiones parciales:

1. Las mediciones realizadas con el MFL reflejan resultados en consonancia con lo reportado en la bibliografía según la tendencia con respecto al aumento de la temperatura y la magnitud de los valores.
2. Se emplearon tres métodos para obtener modelos predictivos, APF, KNN y RNA, en todos los casos se utilizaron como variables de entrada los valores de composición química de las marcas de aceros y temperatura para obtener la propiedad termofísica como respuesta.
3. Los modelos en los que se emplean solamente como variables de entrada las correspondientes a los cuatro grupos declarados ofrecen menor incertidumbre que el modelo con la totalidad de los valores disponibles en la gran mayoría de los casos, aunque implica un considerable aumento en el costo computacional.
4. El comportamiento de la incertidumbre con respecto al aumento de la temperatura varía considerablemente en tendencia y magnitud entre APF y los métodos de aprendizaje automático (KNN y RNA). Esto es debido a la mayor capacidad de estos últimos para explicar comportamientos no lineales.

CAPÍTULO 3 ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

En este capítulo es realizada la validación de los modelos obtenidos. Posteriormente son comparados los modelos para definir finalmente cual es de menor incertidumbre y posteriormente es validado con valores registrados en la bibliografía.

3.1 Validación de los modelos

Los modelos matemáticos obtenidos a partir de la totalidad de los datos, en el caso de KNN y RNA son validados con el conjunto reservado para este fin desde el pre procesamiento de los datos, correspondiente al 20% del total. En el caso de APF la validación inicial es realizada con una selección aleatoria del total de los datos solamente, ya que en este caso no se ha reservado conjunto de validación por el hecho de que para la obtención de las ecuaciones del modelo se ha trabajado con los valores medios de composición química y propiedades de cada uno de los materiales. Luego se ha realizado el cómputo de las métricas referentes a la totalidad de los datos vs los valores obtenidos al emplear los valores de composición química y temperatura con las ecuaciones obtenidas. En la tabla 3.1 se resumen los valores de las métricas comparativas para cada propiedad y método empleado con el fin de poder realizar una comparación entre ellos.

Tabla 3.1 Comparación de los modelos empleados

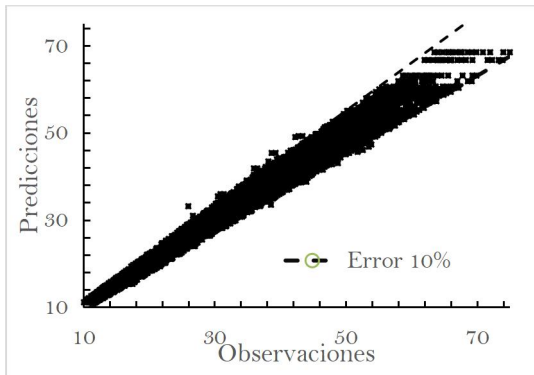
		<i>APF</i>	<i>KNN</i>	<i>RNA</i>
<i>Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)</i>	RMSE	6,26	1,65	2,12
	MAE	3,68	1,31	1,63
	R^2	0,98	0,98	0,97

<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>	RMSE	39,41	3,93	19,65
	MAE	5,03	3,23	14,23
	R^2	0,80	0,99	0,94
<i>Densidad (kg/m³)</i>	RMSE	96,69	7,47	23,55
	MAE	8,89	3,57	16,64
	R^2	0,27	0,99	0,94
<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>	RMSE	0,16	0,034	0,052
	MAE	0,35	0,026	0,039
	R^2	0,73	0,98	0,97

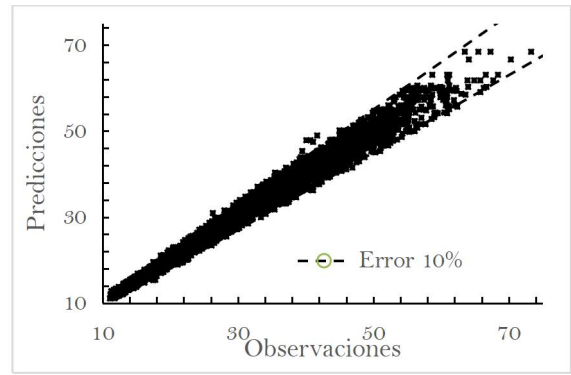
De los valores presentados en la Tabla 3.1 se concluye que el modelo APF presenta la mayor incertidumbre según todas las métricas tenidas en cuenta para las propiedades estudiadas, siendo entre tres y diez veces mayor que la incertidumbre de los modelos KNN y RNA; por esta razón se decide no continuar con la validación de APF. Cabe destacar que en todos los casos las tres métricas (RMSE, MAE y R^2) coinciden, según los criterios planteados en el epígrafe 1.5, al indicar que el modelo con menor incertidumbre es KNN. Por lo anteriormente demostrado se procede a validar los modelos KNN y ANN, en cuanto a APF queda descartado como posible modelo a emplear.

3.1.1 Modelos KNN

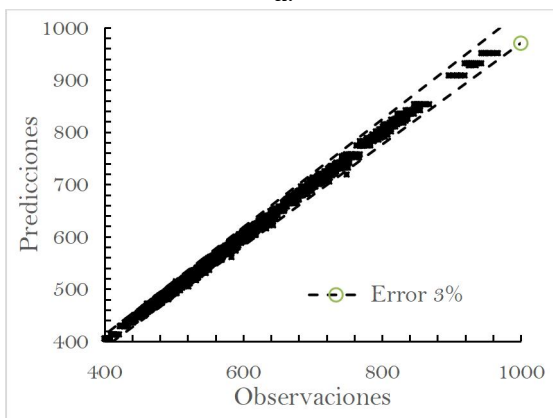
En la figura 3.1 se resumen los valores medidos experimentalmente (observaciones) en función de los valores que se obtienen con el modelo KNN (predicciones) para los conjuntos de entrenamiento y validación.



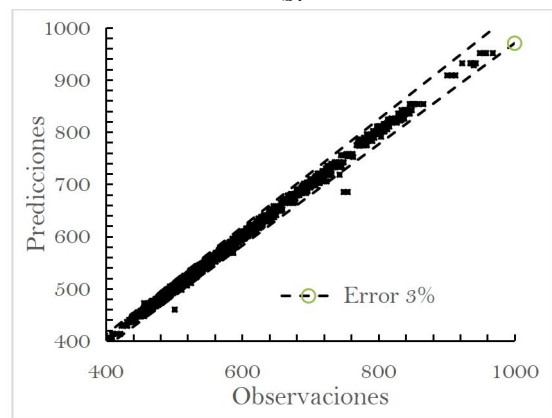
a.



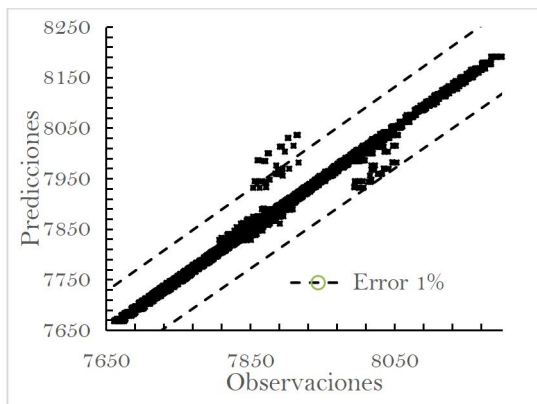
b.



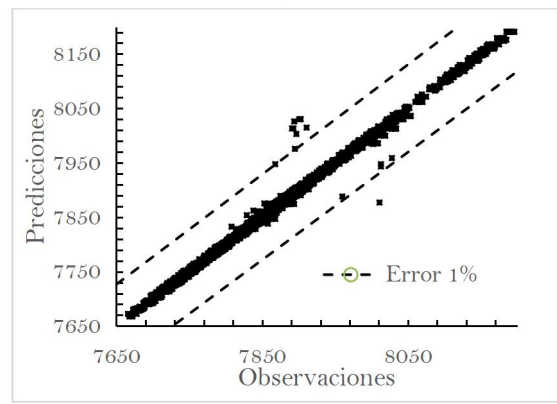
c.



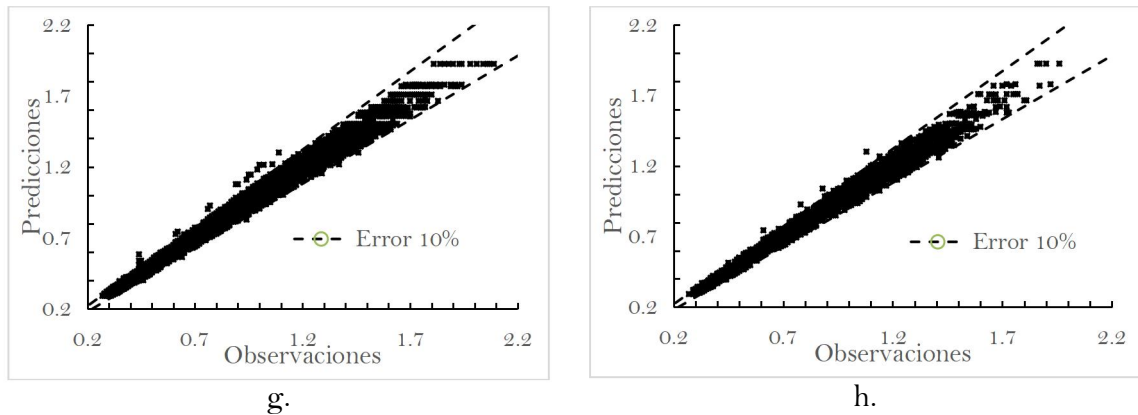
d.



e.



f.



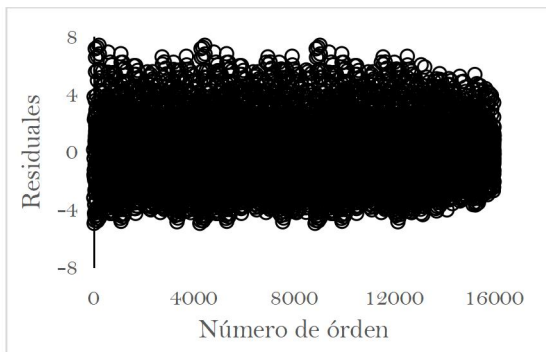
g. h.

Figura 3.1. Observaciones vs predicciones a) Conductividad térmica conjunto de entrenamiento, b) Conductividad térmica conjunto de validación, c) Calor específico conjunto de entrenamiento, d) Calor específico conjunto de validación, e) Densidad conjunto de entrenamiento, f) Densidad conjunto de validación, g) Difusividad conjunto de entrenamiento, h) Difusividad conjunto de validación.

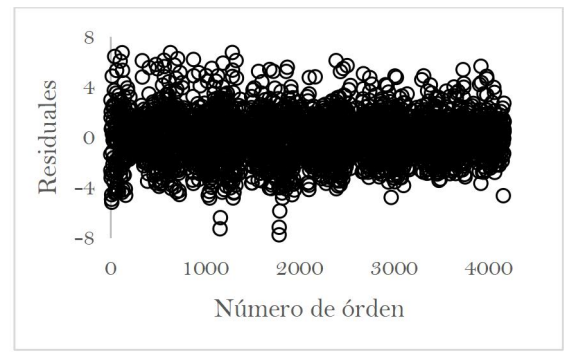
La elaboración de la figura 3.1 tributa a la validación del modelo KNN al realizar un gráfico de dispersión en el que se hace corresponder el conjunto de datos medidos experimentalmente con los valores que ofrece el modelo en el que al ser perfecto el ajuste del modelo y mínima la incertidumbre la línea de tendencia sería a una ecuación del tipo $y = x$. Se aprecia que para todas las propiedades estudiadas el conjunto de puntos es similar en ambos conjuntos y que se pueden encerrar entre valores de error menores al 10% en los casos de conductividad térmica y difusividad, menor al 3% en el caso del calor específico y menor al 1% en el caso de la densidad.

En la figura 3.2 son representados los residuales de los conjuntos de entrenamiento y de validación. Deberá observarse si los residuos son aleatorios, si no presentan patrones sistemáticos, esto puede implicar que el modelo utilizado para analizar los datos es apropiado y las variables independientes incluidas en el modelo son suficientes para explicar la variabilidad en la variable dependiente. Para determinar si la varianza de los

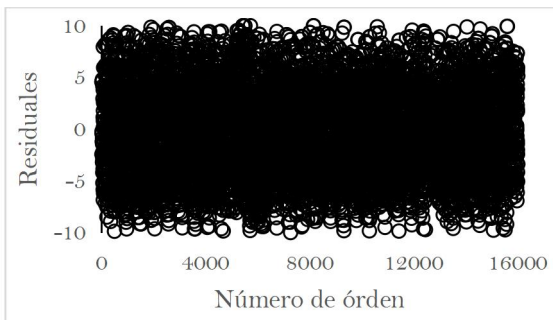
errores es constante en el gráfico de residuales, es importante examinar si los puntos están dispersos de manera uniforme y aleatoria a lo largo de una línea horizontal. Cualquier patrón observable indicaría una falta de constancia en la varianza de los errores. Además, si los residuales se pueden encerrar entre bandas horizontales es posible afirmar que no se presentan defectos obvios en el modelo (Montgomery, Peck, y Vining, 2021).



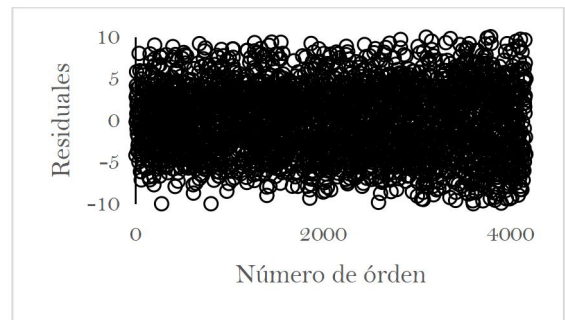
a.



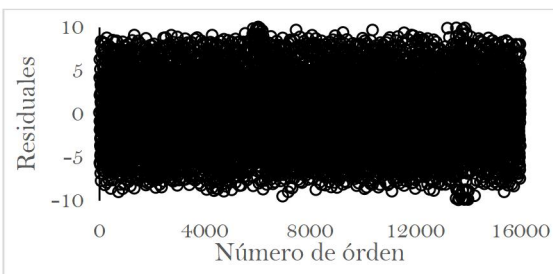
b.



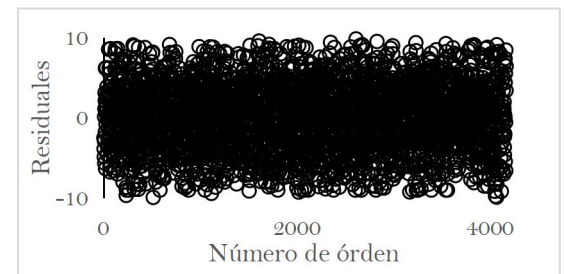
c.



d.



e.



f.

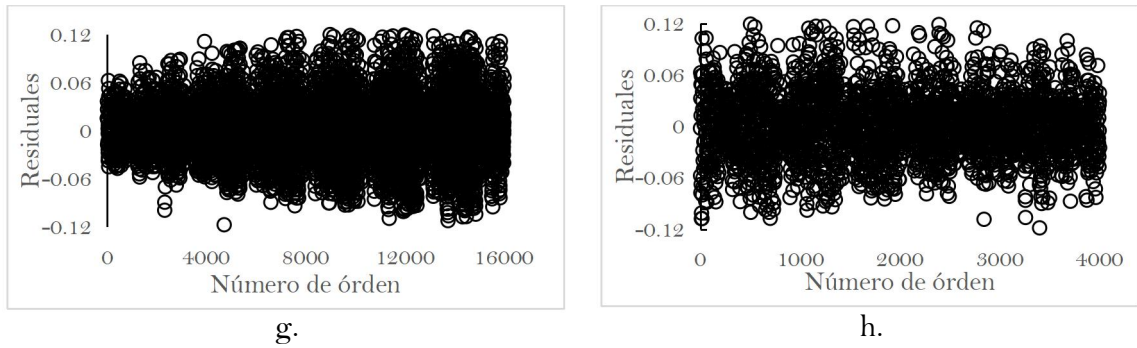


Figura 3.2. Residuales KNN a) Conductividad térmica conjunto de entrenamiento, b) Conductividad térmica conjunto de validación, c) Calor específico conjunto de entrenamiento, d) Calor específico conjunto de validación, e) Densidad conjunto de entrenamiento, f) Densidad conjunto de validación, g) Difusividad conjunto de entrenamiento, h) Difusividad conjunto de validación.

De la figura 3.2 se resume que para el caso del modelo KNN se cumple con que los residuales de los conjuntos de entrenamiento y validación son similares en cuanto a magnitud y distribución. En todos los casos los residuales se distribuyen de forma aleatoria y uniforme a lo largo de la línea $x=0$. Los residuos son aleatorios. Por lo que es posible afirmar que el modelo no presenta defectos obvios.

En la tabla 3.2 se resumen los valores de error del modelo respecto a la data experimental para el modelo KNN. Son agrupados según la magnitud del error (1%, 2%, 5% y 10%). En las columnas nombradas Entrenamiento y Validación está el porcentaje de valores de estos conjuntos que cumple con presentar un error menor al valor correspondiente en la columna %.

Tabla 3.2. Cantidad de valores en rango de error.

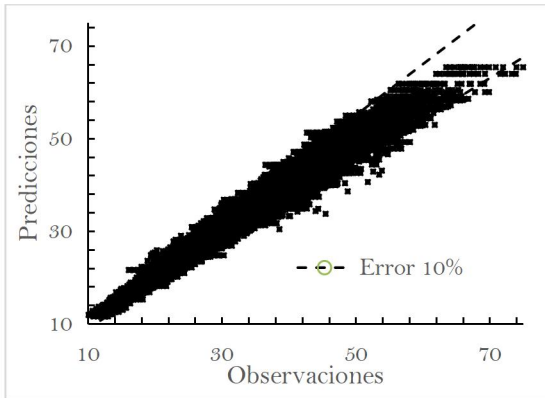
	<i>Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)</i>		<i>Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)</i>	
<i>(%)</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>

1	12,5	11,6	83,91	85,3
2	26,8	25,1	99,62	99,6
5	71,9	70,6	99,93	100
10	98,1	97,1	99,98	100
	<i>Densidad (kg/m³)</i>		<i>Difusividad ((m²/s)10⁻⁵)</i>	
(%)	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>
1	99,7	99,8	15,13	15,9
2	100	100	30,20	33
5	100	100	77,70	80,2
10	100	100	99,33	99,7

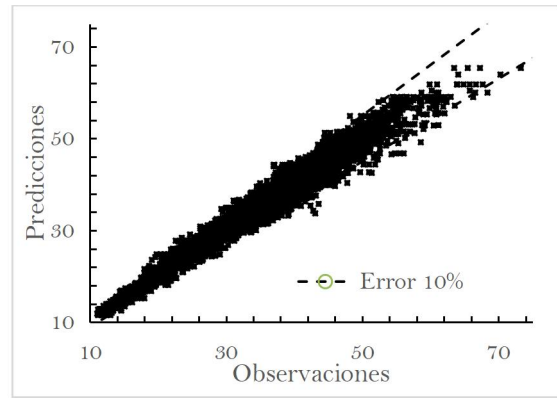
Según los valores de la tabla 3.2 se confirma que la diferencia porcentual entre las mediciones y el valor predicho por el modelo KNN es, en gran mayoría, inferior al 10% de forma general y en el caso del calor específico y la densidad inferior al 2%. Además, es similar en ambos conjuntos.

3.1.2 Modelos RNA

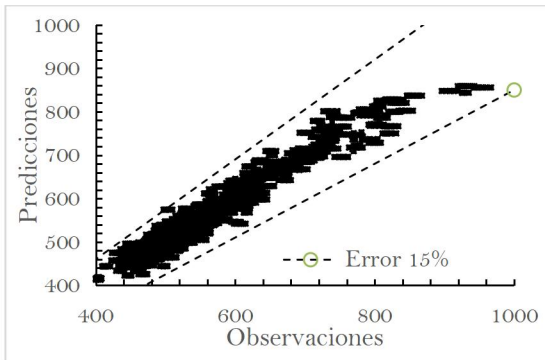
En la figura 3.3 se grafican los valores predichos por el modelo RNA (predicciones) en función de los valores medidos (observaciones). Se persigue el mismo objetivo que con la figura 3.1, tributando a la interpretación de la incertidumbre ofrecida por el modelo a partir de la similitud de los valores de las observaciones respecto a las predicciones.



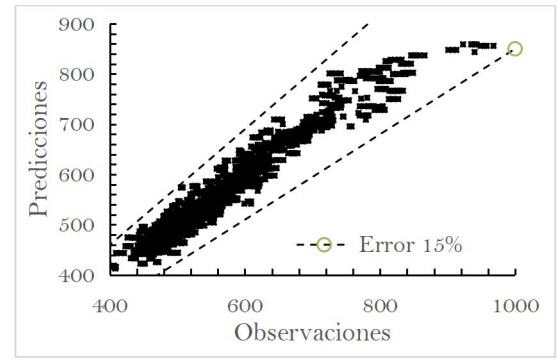
a.



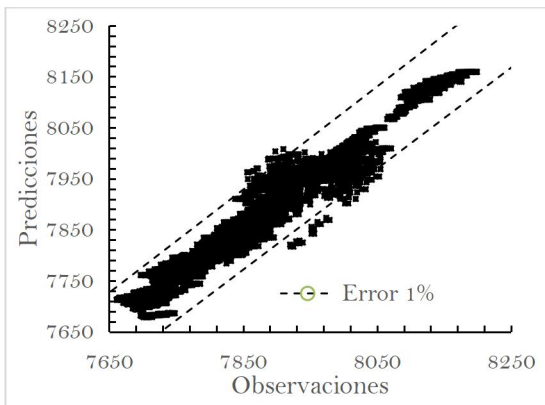
b.



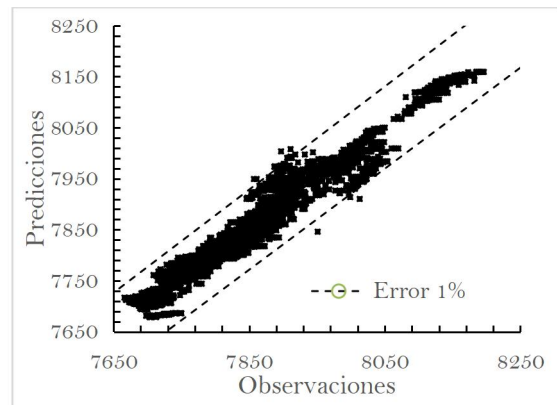
c.



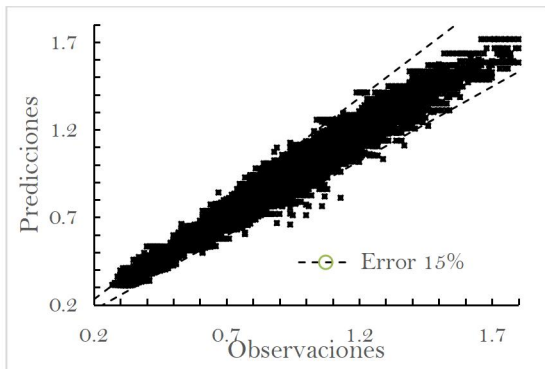
d.



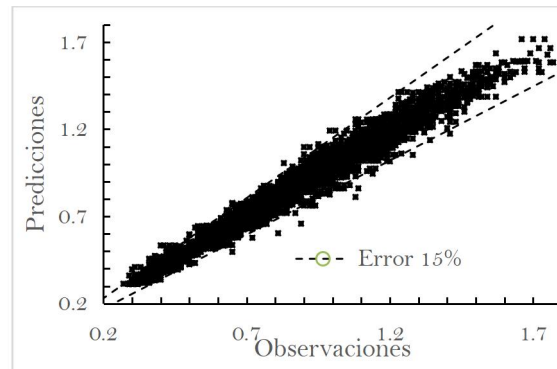
e.



f.



g.

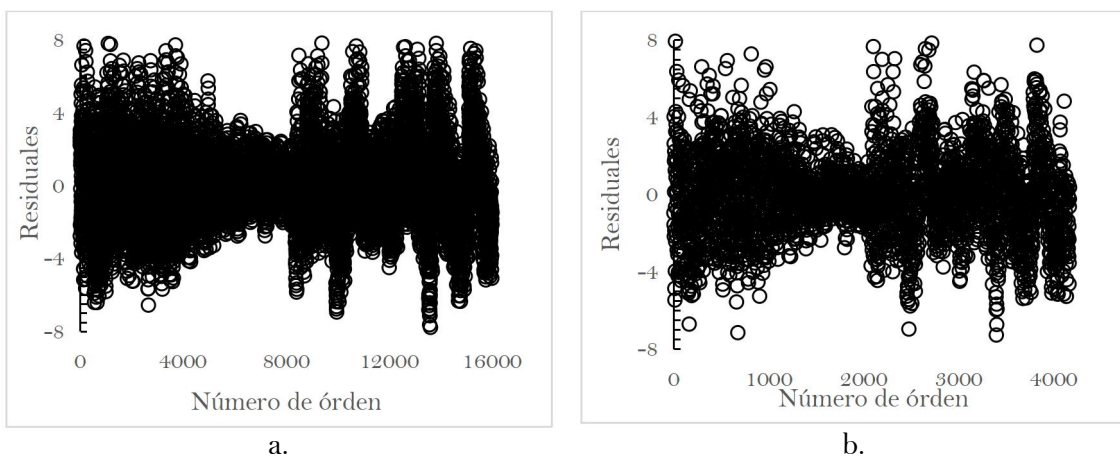


h.

Figura 3.3. Predicciones vs observaciones a) Conductividad térmica conjunto de entrenamiento, b) Conductividad térmica conjunto de validación, c) Calor específico conjunto de entrenamiento, d) Calor específico conjunto de validación, e) Densidad conjunto de entrenamiento, f) Densidad conjunto de validación, g) Difusividad conjunto de entrenamiento, h) Difusividad conjunto de validación.

Del análisis de la figura 3.3 se resume que para RNA las magnitudes de diferencia porcentual entre el valor medido y las predicciones en comparación a los valores ofrecidos por KNN son inferiores en el caso del calor específico y la difusividad; similares para la conductividad térmica y la densidad. Este análisis permite reforzar que el modelo KNN presenta menor incertidumbre que RNA; lo que anteriormente se avala por RMSE, MAE menores para KNN y R^2 mayor para KNN.

En la figura 3.4 son representados los residuales de los conjuntos de entrenamiento y validación, de forma similar a la figura 3.2, el objetivo de elaborar estos gráficos es la validación del modelo, en este caso RNA.



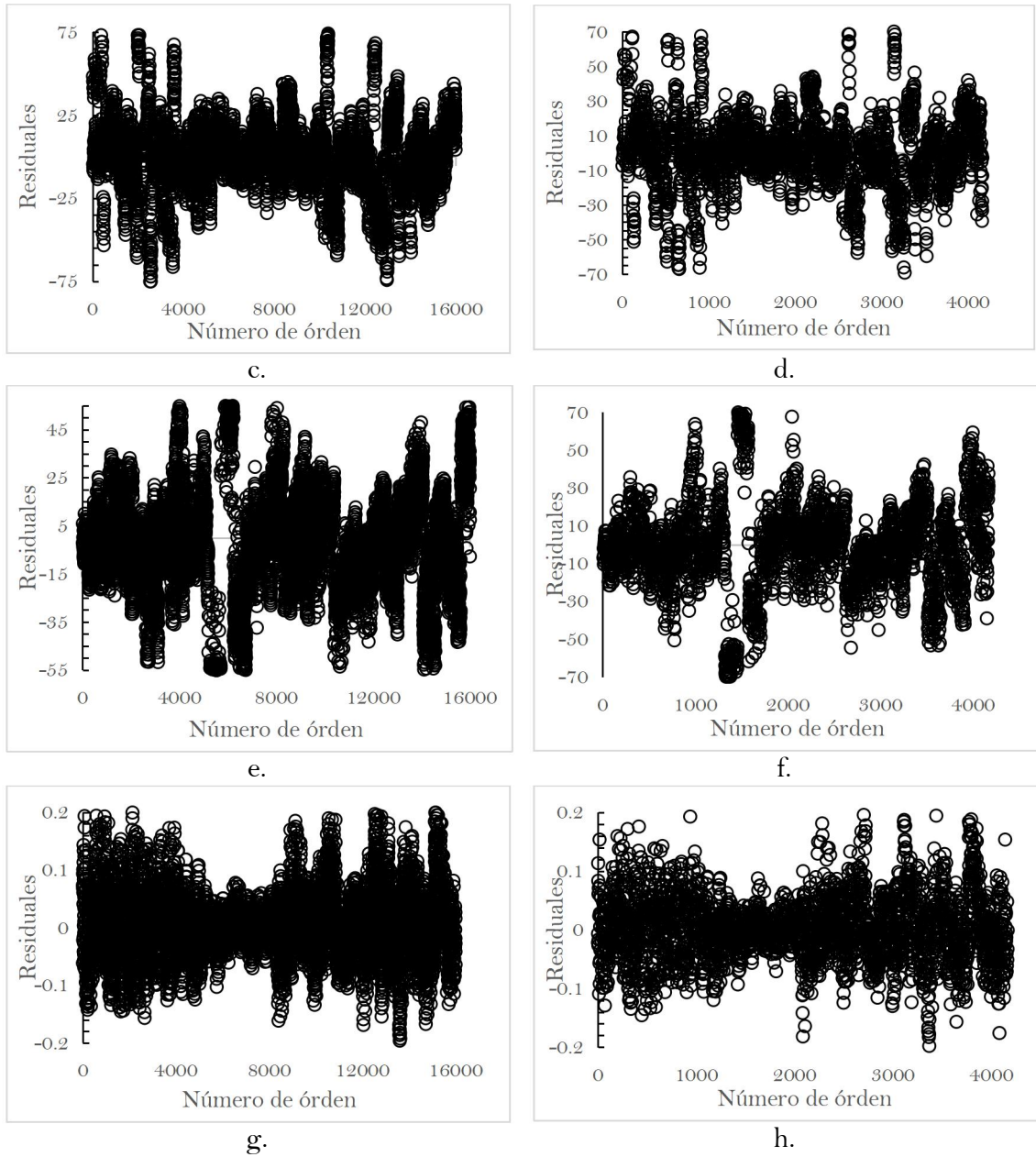


Figura 3.4. Residuales a) Conductividad térmica conjunto de entrenamiento, b) Conductividad térmica conjunto de validación, c) Calor específico conjunto de entrenamiento, d) Calor específico conjunto de validación, e) Densidad conjunto de entrenamiento, f) Densidad conjunto de validación, g) Difusividad conjunto de entrenamiento, h) Difusividad conjunto de validación.

Se resume de la figura 3.4 que los residuales para el modelo RNA, a pesar de ser similares en el conjunto de prueba y validación, presentan patrones y no están

distribuidos de forma aleatoria, sugiriendo que con el modelo no se explica correctamente la variable independiente. Superan en magnitud a los residuales ofrecidos por el modelo KNN en todas las propiedades analizadas. Todo lo planteado confirma que el modelo KNN presenta menor incertidumbre que el RNA.

En la tabla 3.3 son resumidos, en valores porcentuales, la cantidad de datos en los rangos de error 1, 2, 5 y 10 % de los valores obtenidos con el modelo RNA respecto a los valores experimentales.

Tabla 3.3. Cantidad de valores en rango de error.

	<i>Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)</i>		<i>Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)</i>	
<i>(%)</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>
1	12,3	12,9	28,8	30,2
2	24,8	25,1	52,3	53,4
5	58,6	58,6	85,1	85,1
10	90,7	90,9	98,8	98,8
	<i>Densidad (kg/m^3)</i>		<i>Difusividad ($(m^2/s)10^{-5}$)</i>	
<i>(%)</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>	<i>Entrenamiento</i>	<i>Validación</i>
1	99,5	99,6	12,1	12,0
2	100	100	25,4	24,5
5	100	100	59,1	57,7
10	100	100	89,4	88,7

A partir de los valores de la tabla 3.3 se confirma que la diferencia porcentual entre las mediciones y el valor predicho por el modelo RNA es mayormente inferior al 10% de forma general y para la densidad inferior al 1%. A pesar de ser resultados óptimos, en comparación con los valores ofrecidos por KNN demuestran la existencia de una mayor incertidumbre.

3.2 Análisis y comparación de los resultados ofrecidos por los modelos

En las tablas 3.4 a 3.7 se resumen los valores de desviaciones máximas y mínimas para cada una de las marcas de aceros AISI estudiadas, calculadas según la ecuación (3.1), así como los valores de MAE para cada uno de los casos entrenados con la totalidad de la data, los casos de los modelos entrenados con los datos para grupos de aceros individualizados son resumidos en los anexos 15 a 18. Para este análisis sobre la incertidumbre entre los modelos obtenidos en la presente investigación es escogida la métrica MAE por su simplicidad e interpretación intuitiva, cabe señalar que para la previa validación de estos se han tenido en cuenta, además, los criterios ofrecidos por RMSE, R^2 y la interpretación de gráficos de predicciones vs observaciones y gráficos de residuales. Mediante estos datos es realizado el análisis de los resultados ofrecidos por los modelos.

$$D\% = \left(\frac{Y_{real} - Y_{modelo}}{Y_{real}} \right) 100 \quad (3.1)$$

Dónde: $D\%$ es la desviación porcentual; Y_{real} es el valor medido y Y_{modelo} es el valor obtenido por el modelo.

Tabla 3.4. Resumen comparativo de métricas para conductividad térmica.

<i>Modelo general</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-11,48	9,97	1,94	-12,16	10,82	1,99
1030	-11,88	10,36	1,71	-19,89	9,09	2,03
1045	-11,60	9,77	1,94	-8,73	12,98	1,96

1078	-11,07	10,30	1,56	-16,49	11,05	1,84
1095	-10,60	10,50	1,72	-11,97	11,74	1,70
1145	-11,82	11,07	1,85	-19,30	9,27	2,04
1345	-12,03	11,47	1,96	-14,23	10,97	1,86
1524	-11,85	10,09	1,75	-9,62	10,65	1,81
2330	-12,47	10,58	1,09	-10,53	13,86	1,21
2515	-9,05	10,34	1,15	-10,43	10,42	1,16
301	-9,97	13,42	0,77	-15,66	15,67	0,86
302	-10,83	10,84	0,69	-15,86	13,18	0,77
304	-9,97	10,37	0,67	-13,03	13,60	0,75
310	-12,05	10,45	0,64	-14,39	15,39	0,79
316	-12,61	8,76	0,61	-11,93	8,98	0,67
347	-11,46	9,01	0,68	-13,66	8,01	0,73
4028	-12,64	10,56	1,97	-11,22	16,49	2,03
405	-12,11	11,07	1,39	-17,96	16,33	1,58
410	-11,67	7,80	1,01	-13,07	9,72	1,42
4130	-11,09	9,99	1,48	-18,85	8,43	2,24
4140	-10,78	10,62	1,55	-7,22	17,97	2,61
420	-13,08	11,81	1,15	-17,07	10,02	1,27
430	-11,68	9,92	1,06	-9,18	10,95	1,06
4320	-10,49	10,24	1,39	-11,61	12,74	1,41
4626	-10,30	9,88	1,49	-6,60	16,04	1,93
5132	-13,62	10,58	1,63	-12,59	13,54	1,64
5140	-12,07	9,91	1,66	-19,69	12,68	2,36
6150	-11,08	10,43	1,52	-23,42	11,28	1,66
8115	-11,67	9,48	1,34	-18,31	4,95	2,24
8617	-12,70	10,92	1,51	-6,47	16,64	2,48
8650	-11,14	8,65	1,13	-25,22	6,79	2,21
8822	-19,35	9,15	1,64	-18,99	21,77	1,79

De la tabla 3.4 se realiza el análisis del comportamiento de la conductividad térmica y se destaca que para la conductividad térmica, empleando para las comprobaciones el conjunto de datos reservados con el fin de validar los modelos se resume que:

Para el modelo de KNN entrenado con la totalidad de la data resulta que el 97,2% de los valores obtenidos presenta menos de un 10% de diferencia con los valores experimentales, el 70,7 menos de un 5%, el 25,2 menos de un 2% y el 11,7 menos de un 1%. La incertidumbre mayor corresponde al acero AISI 4028, con 1,9672 y la menor responde al acero 316 con valor de 0,6057. Para este caso el valor medio de MAE es de 1,36

Al entrenar el modelo KNN con la data dividida en los grupos de aceros definidos con anterioridad se obtiene que la mayor incertidumbre corresponde al acero AISI 1008 con MAE de 1,99 y la menor se encuentra con el AISI 316, con 0,58. La media de MAE en este caso es de 1,23. Para el modelo entrenado con la totalidad de la data empleando RNA el 90,9% de los valores obtenidos aplicando el modelo presenta una desviación menor al 10%, el 58,7% menor al 5%, el 25,1 menor al 2% y el 13% menor al 1%. La mayor incertidumbre corresponde al AISI 4140 con MAE de 2,61 y el AISI 316, con MAE de 0,67, resulta el de menor.

En el caso de los modelos entrenados con RNA para los grupos individuales se detecta que la mayor incertidumbre está presente en el AISI 1008 con 1,96 y las menores corresponden a AISI 316 con 0,57. La media de MAE para este caso es de 1,21. A modo comparativo entre los modelos es confirmado que el modelo que presenta los mejores ajustes es el KNN entrenado con la totalidad de los datos, con MAE de 1,36. Sin embargo, para los grupos entrenados de forma individual los resultados varían. En el

caso del grupo 1 la menor incertidumbre la proporciona el modelo KNN con la totalidad de la data con MAE de 1,77; en los casos de los grupos 2, 3 y 4 el modelo RNA entrenado para datos individuales resulta con menor incertidumbre, con MAE de 0,66; 1,12 y 1,28 respectivamente. La menor incertidumbre es obtenida para los aceros del grupo 2 con MAE 0,66 para el modelo RNA entrenado con valores del grupo solamente y más elevadas para los aceros AISI 4140, 5140, 8115, 8617 y 8150 con el modelo RNA para la totalidad de la data, todos con MAE superiores a 2,35.

Tabla 3.5. Resumen comparativo de métricas para calor específico.

<i>Modelo general</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-1,81	1,19	3,15	-6,97	11,34	15,83
1030	-1,54	1,72	4,01	-5,52	6,19	14,62
1045	-1,58	1,56	3,59	-6,99	4,56	11,57
1078	-1,55	1,79	3,97	-10,28	10,26	19,22
1095	-1,29	1,75	3,61	-10,91	11,59	28,87
1145	-1,41	1,66	3,07	-10,49	4,43	12,82
1345	-1,59	1,53	3,64	-10,32	8,09	21,22
1524	-1,56	1,65	3,56	-4,06	7,65	10,49
2330	-1,93	1,54	3,21	-6,66	4,16	12,31
2515	-1,78	1,59	3,35	-5,54	6,91	9,78
301	-1,62	2,63	3,78	-3,20	5,45	10,66
302	-2,02	2,57	3,67	-2,93	4,14	7,07
304	-1,52	1,56	3,23	-3,09	3,14	7,09
310	-1,42	1,55	3,39	-4,03	4,48	6,32
316	-3,51	1,63	3,30	-1,98	6,49	10,53
347	-2,02	1,51	3,47	-5,76	5,38	6,63
4028	-1,92	1,95	3,71	-5,27	8,48	20,87
405	-1,44	1,93	3,67	-4,31	7,11	12,60

410	-1,69	1,57	3,17	-5,50	3,94	8,59
4130	-1,76	1,45	3,04	-7,18	4,85	9,39
4140	-1,69	1,93	3,33	-10,13	9,72	31,63
420	-1,80	1,83	3,10	-9,13	2,78	6,95
430	-1,59	2,00	3,26	-3,75	4,55	8,42
4320	-1,65	1,71	3,71	-9,60	4,29	12,39
4626	-1,76	1,87	2,57	-16,03	8,99	32,06
5132	-1,35	1,45	3,09	-13,69	7,20	26,62
5140	-1,72	1,73	2,91	-6,00	0,87	12,83
6150	-1,65	1,61	3,35	-9,55	4,35	9,75
8115	-1,39	1,61	3,20	-7,71	4,36	16,76
8617	-1,63	1,61	3,58	-3,20	4,75	7,10
8650	-1,21	1,51	3,38	-2,03	7,76	20,41
8822	-1,49	9,27	5,13	-6,47	5,95	14,02

A partir de los valores resumidos en la tabla 3.5 sobre el comportamiento del calor específico al aplicar los modelos en el conjunto de validación cabe destacar que:

En el caso del modelo KNN para la totalidad de los datos el 99,62% de los valores obtenidos mediante el modelo presenta un error menor al 2% con respecto a los datos experimentales y el 83,91 un error menor al 1%. El acero AISI 8822 con MAE 5,13 destaca como el de mayor incertidumbre y el AISI 4626 como el de menor. El valor medio de MAE para este modelo es de 3,44. Para el modelo obtenido mediante KNN empleando para el entrenamiento los datos de los grupos de forma individual se obtiene que la mayor incertidumbre corresponde al acero AISI 8822 con valor de 4,84 y el menor para AISI 8115 con MAE de 2,97. En este caso el valor medio es de 3,54.

El modelo RNA con toda la data indica que el acero con mayor incertidumbre es el AISI 4626 con MAE de 32,06, cabe destacar que el valor difiere considerablemente respecto al modelo KNN (12,4 veces mayor). La menor incertidumbre corresponde a AISI 310 con MAE 6,32. La media del modelo es de 14,23, valor seriamente afectado por los aceros 1095, 4140, 4626 y 5132; todos con MAE superior a 25. En cuanto a la aplicación de RNA con datos de grupos individuales se aprecia que AISI 1078 con MAE de 10,07 es el acero con mayor incertidumbre; AISI 310 con MAE 3,58 es el de menor. La media para estos modelos es de 5,29.

Con el fin de comparar la incertidumbre de los modelos se destaca que el modelo que presenta los mejores ajustes es KNN entrenado con la totalidad de la data, con MAE 3,44. Teniendo en cuenta los grupos entrenados de forma individual los modelos RNA para la totalidad de la data 1, 2 y 4 con MAE 3,66; 3,43 y 3,71 respectivamente y el modelo KNN con toda la data para el grupo 3 con MAE 3,29 resultan los de menor incertidumbre, siendo este último el de menor incertidumbre de manera general. Las mayores incertidumbres se encuentran en los AISI 4140, 5140, 8115, 8617 y 8150 para el modelo RNA con toda la data.

Tabla 3.6. Resumen comparativo de métricas para densidad.

<i>Modelo general</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-0,10	0,11	3,26	-0,27	0,11	7,03
1030	-0,10	0,10	3,06	-0,25	0,29	6,72
1045	-0,11	0,11	3,38	-0,29	0,45	9,84
1078	-0,09	0,11	2,95	-0,36	0,36	9,90
1095	-0,09	0,12	3,07	-0,32	0,13	7,89

1145	-0,10	0,11	3,01	-0,66	0,27	18,16
1345	-0,10	0,11	3,24	-0,32	0,26	6,81
1524	-0,11	0,12	2,87	-0,46	0,82	21,24
2330	-0,09	0,10	2,85	-0,23	0,44	8,23
2515	-0,11	0,11	3,33	-0,18	0,49	11,66
301	-1,67	0,11	11,35	-1,35	0,12	57,02
302	-0,12	1,67	9,30	-1,09	1,28	61,54
304	-0,11	0,11	3,30	-0,78	0,77	34,72
310	-0,11	0,13	3,42	-0,62	0,32	10,47
316	-0,11	0,11	3,36	-0,33	0,31	8,63
347	-0,11	0,12	3,55	-0,36	0,88	15,46
4028	-0,11	0,11	3,29	-0,37	0,50	11,01
405	-0,11	0,11	3,07	-0,37	0,38	10,21
410	-0,11	0,11	3,38	-0,41	0,46	10,71
4130	-0,11	0,11	3,14	-0,22	0,39	7,52
4140	-0,11	0,12	3,27	-0,69	0,33	22,03
420	-0,11	0,16	3,52	-0,48	0,16	12,27
430	-0,12	0,11	3,27	-0,58	0,02	10,32
4320	-0,12	0,12	3,14	-0,33	0,30	8,63
4626	-0,11	0,11	3,37	-0,46	0,08	11,90
5132	-0,12	0,11	3,57	-0,18	0,37	9,53
5140	-0,31	0,27	7,30	-0,57	0,54	21,26
6150	-0,11	0,12	3,63	-0,69	0,16	26,84
8115	-0,11	0,11	3,29	-0,39	0,34	9,56
8617	-0,12	0,12	3,27	-0,54	0,53	19,35
8650	-0,12	0,12	3,54	-0,16	0,75	25,91
8822	-0,11	0,90	4,23	-0,49	1,32	17,73

De la tabla 3.6 se resume que el comportamiento en el caso de la densidad corresponde a:

Para el modelo entrenado con la totalidad de los datos mediante KNN resulta que el 99,7% de los valores predichos por el modelo tienen un error menor al 1% con respecto

a los valores experimentales. El acero AISI 301 resalta como el de mayor incertidumbre con MAE 11,35 y en caso opuesto se encuentra el AISI 2330 con MAE 2,85. Para este modelo el valor medio de MAE es de 3,86. En el caso del modelo KNN entrenado con valores individuales de cada grupo la mayor incertidumbre está presente en los aceros AISI 301 y 302 con MAE 14,03. El AISI 1030 con MAE 2,97 resulta el de menor incertidumbre. El valor de promedio de MAE es de 4,48.

Al entrenar el modelo empleando RNA con todos los datos, corresponden a la mayor incertidumbre los aceros AISI 301 y 302 nuevamente, aunque en este caso con MAE considerablemente mayores (57,02 y 61,04 respectivamente). Con la menor incertidumbre repite el AISI 1030 con MAE 6,72. Finalmente, para todo el modelo MAE resulta en 16,57. Al entrenar con los grupos de forma individual empleando RNA, AISI 301 y 302 reinciden como aceros con mayores incertidumbres (16,01 y 15,08 respectivamente). Con menor se encuentran AISI 1030 con MAE 2,93. MAE media del modelo es 5,20.

Por lo tanto, para la densidad, queda comprobado que el modelo que menor incertidumbre ofrece es KNN entrenado con la totalidad de los datos, con MAE 3,86. Con el fin de obtener resultados con menor incertidumbre debe emplearse para los casos de los grupos 3 y 4 los modelos obtenidos al entrenar con datos individuales con RNA, que superan al resto de los modelos con MAE 3,13 y 3,23 respectivamente. Teniendo en cuenta todos los modelos entrenados, las mayores incertidumbres resultan con RNA para la totalidad de la data para AISI 301 y 302.

Tabla 3.7. Resumen comparativo de métricas para difusividad.

<i>Modelo general</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-9,74	9,08	0,04	-10,39	8,21	0,04
1030	-8,42	8,86	0,03	-21,20	15,36	0,05
1045	-11,14	8,96	0,04	-12,92	10,64	0,04
1078	-7,66	8,24	0,03	-22,93	17,66	0,05
1095	-10,52	8,19	0,03	-33,34	19,81	0,05
1145	-8,78	9,52	0,04	-8,29	11,18	0,04
1345	-10,04	9,32	0,04	-16,87	10,74	0,05
1524	-9,63	8,84	0,04	-11,18	11,72	0,04
2330	-10,17	8,90	0,02	-14,52	12,57	0,03
2515	-9,37	9,16	0,02	-13,05	11,48	0,03
301	-11,62	9,22	0,02	-24,47	15,70	0,02
302	-8,74	9,51	0,01	-18,53	8,33	0,02
304	-9,43	10,04	0,01	-11,17	16,85	0,02
310	-9,91	8,08	0,01	-24,34	7,45	0,02
316	-9,39	10,11	0,01	-8,78	13,42	0,02
347	-12,12	8,21	0,01	-16,03	12,69	0,02
4028	-10,71	9,17	0,04	-20,36	6,51	0,05
405	-10,92	8,99	0,03	-11,52	17,09	0,04
410	-11,10	8,68	0,03	-11,56	14,09	0,04
4130	-9,52	9,92	0,03	-14,35	11,39	0,04
4140	-9,62	10,69	0,03	-12,82	18,92	0,05
420	-10,58	8,89	0,02	-22,21	7,55	0,04
430	-9,21	8,50	0,02	-13,38	12,63	0,03
4320	-7,98	9,61	0,03	-17,03	12,27	0,05
4626	-10,32	8,59	0,04	-10,91	14,29	0,05
5132	-9,15	9,17	0,03	-21,96	7,89	0,06
5140	-9,85	8,42	0,04	-12,08	14,75	0,05
6150	-9,85	8,34	0,03	-19,53	9,27	0,04

8115	-10,29	9,58	0,03	-18,89	17,26	0,05
8617	-10,16	9,04	0,03	-9,04	21,05	0,06
8650	-20,42	9,26	0,03	-31,92	24,90	0,04
8822	-21,97	8,80	0,08	-21,17	26,06	0,32

De la tabla 3.7 es posible concluir que el comportamiento de los modelos para la difusividad corresponde a:

Para KNN con toda la data disponible el 99,3 % de los valores obtenidos con el modelo presenta un error menor al 10% con respecto a la data experimental, el 77,7% un error menor al 5%, el 30,2 menor al 2% y el 15,13 menor al 1%. El AISI 88,20 ofrece la mayor incertidumbre con MAE de 0,084 y la menor corresponde al AISI 310 con MAE 0,0123. El valor medio de MAE para el modelo es de 0,029. Con el modelo KNN para los grupos de aceros se detecta como mayor incertidumbre, con MAE 0,038 el acero AISI 1045. Las menores incertidumbres corresponden al AISI 302 con MAE 0,012. Para el modelo la media de MAE es de 0,024.

Para el caso del modelo RNA con toda la data resulta nuevamente el acero AISI 8822 el de mayor incertidumbre, solo que el MAE es considerablemente superior (0,3218). La menor incertidumbre la posee AISI 310 con MAE 0,015; inferior al valor ofrecido por KNN. La media del modelo en cuanto a MAE es de 0,048. En RNA entrenado para los grupos de aceros de forma individual el acero 1078 es el de mayor incertidumbre con MAE 0,046 y en caso contrario están las marcas AISI 304, 316 y 347 con MAE 0,012. MAE del modelo es de 0,025.

El modelo que presenta menor incertidumbre es nuevamente KNN con MAE 0,029. Para lograr una menor incertidumbre en el caso de los grupos individuales se

recomienda emplear para los aceros correspondientes a los grupos 2, 3 y 4 el modelo RNA entrenado con las datas individuales y en el caso del grupo 1 en modelo KNN entrenado con la totalidad de los datos. Los resultados de mayor incertidumbre se encuentran en el AISI 8822.

3.3 Validación con datos externos

Con el fin de validar el modelo general con menor incertidumbre obtenido (KNN) y compararlo respecto a la incertidumbre ofrecida por los modelos de otros autores es seleccionado un grupo de datos a partir de una búsqueda bibliográfica realizada considerando un grupo de criterios: el rango de temperaturas deberá encontrarse entre 0 y 800°C; deberá ofrecerse la composición química del acero; no deberán haberse aplicado tratamientos térmicos diferentes al recocido, esto implica considerables diferencias microestructurales en el material y por consiguiente considerables diferencias en las propiedades del mismo, por lo que el modelo será incapaz de conseguir una incertidumbre adecuada. En la tabla 3.8 se resume la composición de un grupo de materiales tomados de la literatura con el fin de validar el modelo con datos externos.

Para realizar la validación del modelo se realizan comprobaciones solamente para conductividad térmica, calor específico y densidad, ya que cómo se expresa en la ecuación (1.4), la difusividad térmica puede calcularse conociendo los valores de las propiedades anteriormente mencionadas. Realizando un análisis lógico, al quedar validadas tres de las cuatro propiedades estudiadas quedan validadas la totalidad de estas.

Para el análisis de los resultados ofrecidos por el modelo KNN respecto a los valores registrados en la bibliografía deberá tenerse en cuenta, en caso de estar fuera de los

límites del modelo en cuanto a composición química, que variables de entrada son las que se encuentran fuera de estos. Como se aprecia en la figura 3.5, la importancia o influencia de las variaciones de las variables de entrada en el modelo, en el caso de la figura para el caso de la conductividad térmica, difieren entre ellas, factor que evidentemente incidirá en la incertidumbre ofrecida por el modelo.

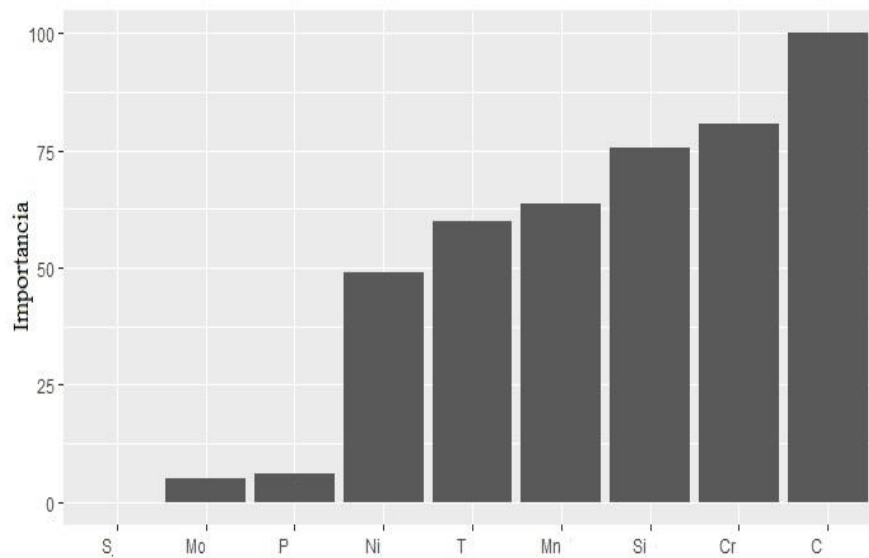


Figura 3.5. Representación gráfica del nivel de importancia de las variables de entrada en la variable de salida según el modelo KNN para conductividad térmica (Roque-Villalonga y Camaraza-Medina, 2022).

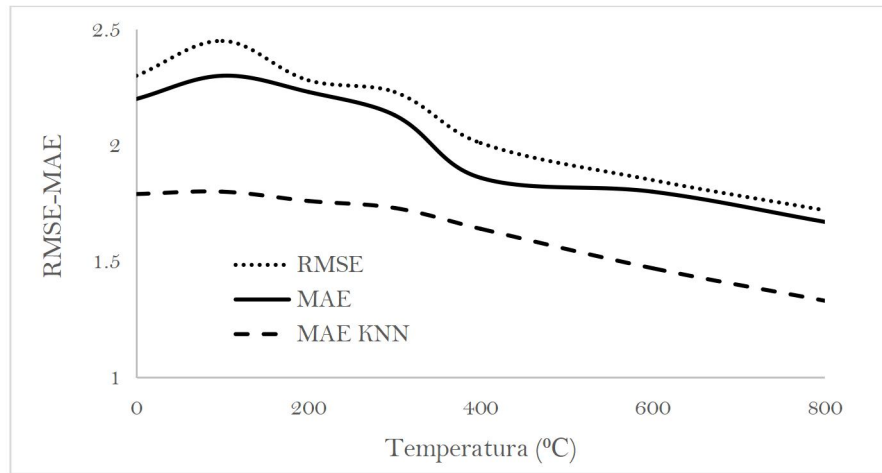
Tabla 3.8. Composición química de materiales empleados para la validación del modelo con valores externos.

<i>C</i>	<i>Mn</i>	<i>P</i>	<i>S</i>	<i>Si</i>	<i>Ni</i>	<i>Cr</i>	<i>Mo</i>	<i>Propiedad</i>	<i>Fuente</i>
1	0,5	0,02	0,03	0,25	0	0	0	λ	(Peet et al., 2011)
1,5	0,5	0,02	0,03	9,25	0	0	0	λ	
0,5	0,5	0,04	0,04	0,25	0	0	0	λ	
0,4	0,5	0,04	0,04	0	3,5	0,8	0	λ	(Holman, 2008)
0,2	0,5	0,04	0,04	0	8	19	0,2	λ	

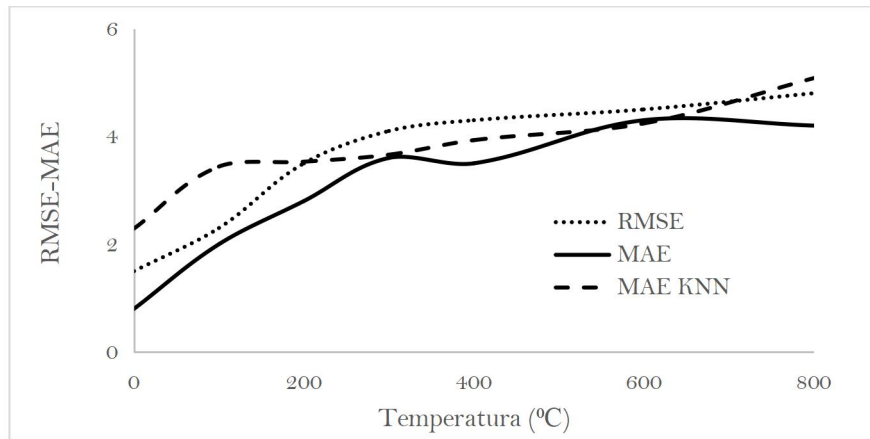
0,1	0,5	0,04	0,04	0	0	26	0	λ	(Leibowitz y Blomquist, 1988)
0,16	1,7	0,03	0,025	0,6	0	0	0	λ, Cp	(Xing et al., 2021)
0,01	1,9	0,03	0,022	0,65	9,3	19,5	0	λ, Cp	(Somasundharam y Reddy, 2020)
0,8	0,32	0,04	0,05	0	0	0	0	Cp	(Bauccio, 1993)
0,06	0,38	0,04	0,04	0	0	0	0	Cp	
0,8	0,32	0,04	0,05	0	0	0	0	Cp	
0,06	0,38	0,04	0,04	0	0	0	0,06	Cp	
0,13	1,9	0,02	0,02	0,63	7	17	0	Cp	(MatWeb, 2022)
0,1	0,3	0,04	0,05	0	0	0	0	Cp	
0,1	0,5	0,04	0,05	0	0	0	0	Cp	
0,1	0,6	0,04	0,05	0	0	0	0	Cp	(Lienert et al., 2011)
0,08	1,3	0,026	0,004	0,52	11,1	18	0	Cp	
0,86	0,6	0,04	0,05	0	0	0	0	Cp	
0,3	0,48	0,02	0,011	0,41	0,5	13,1	0,06	Cp	(Touloukian y Makita, 1970)
0,08	1,3	0,026	0,004	0,52	11,1	18	0	Cp	
0,005	0,12	0,014	0,003	0,01	0	0	0	ρ	(Mizukami et al., 2000)
0,04	0,19	0,026	0,006	0,04	0	0	0	ρ	
0,11	0,48	0,02	0,008	0,1	0	0	0	ρ	
0,14	0,54	0,016	0,003	0,16	0	0	0	ρ	
0,55	0,91	0,021	0,001	0,15	0	0	0	ρ	
0,2	1,9	0,02	0,02	0,6	3,8	18,4	0	ρ	(Mizukami et al., 2002)
0,7	1,9	0,02	0,02	0,7	7,6	18,1	0	ρ	
0,07	1,9	0,02	0,02	0,7	13,7	18,3	0	ρ	
0,2	1,9	0,02	0,02	1,3	25,55	18,1	0	ρ	
0,2	1,9	0,02	0,02	0,6	3,9	25,5	0	ρ	
0,2	1,9	0,02	0,02	1,3	15	25,5	0	ρ	
0,2	1,9	0,02	0,02	1,3	25,1	25,5	0	ρ	

Las composiciones químicas presentadas en la tabla 3.8 se encuentran acompañadas en la bibliografía de un rango de valores de temperaturas, variables que son empleadas

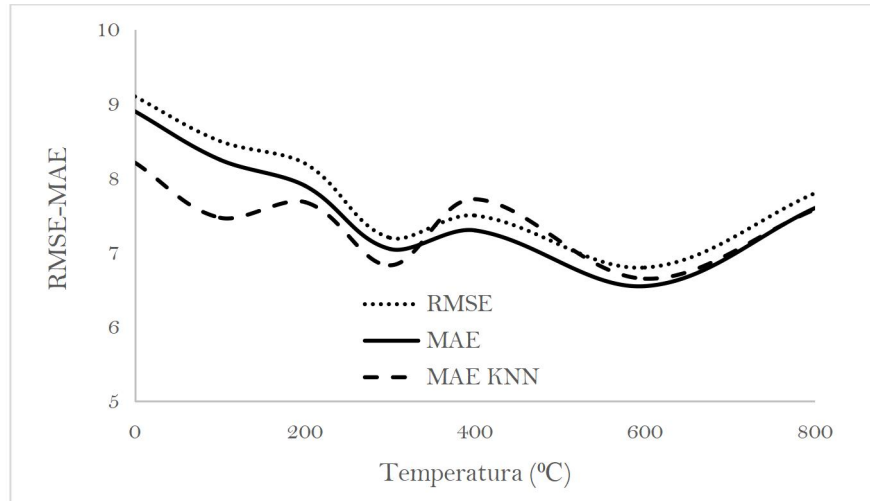
como entradas al modelo KNN, posteriormente los valores obtenidos son comparados con los valores ofrecidos en la literatura y ambos son empleados para calcular RMSE y MAE; la variación de estas métricas en función de la temperatura es resumida en la figura 3.6.



a.



b.



c.

Figura 3.6. Comportamiento de RMSE y MAE respecto a la temperatura. a) Conductividad térmica, b) Calor específico, c) Densidad

En la figura 3.6 se aprecia un comportamiento similar del comportamiento de RMSE y MAE calculados a partir de valores estimados empleando datos disponibles en la bibliografía en comparación con los valores MAE obtenidos para el conjunto de validación con KNN. De esta forma se comprueba la capacidad del modelo para estimar las propiedades objeto de estudio en un amplio grupo de marcas de aceros.

Los intervalos de predicción del modelo KNN se calculan según el código resumido en el anexo 19. Estos intervalos indican, en este caso con un 95% de confianza, la variabilidad de estimaciones futuras. En la figura 3.7 se presentan el intervalo de predicción para el grupo 1 de aceros en el caso de la conductividad térmica y las estimaciones realizadas con KNN. Para la conductividad térmica debe calcularse este intervalo de forma independiente para cada grupo de aceros por las diferencias en la tendencia a aumentar o disminuir con respecto a la temperatura entre ellos; no es el caso para el resto de las

propiedades. En el anexo 20 se resumen en forma de tabla el resto intervalos de predicción calculados.

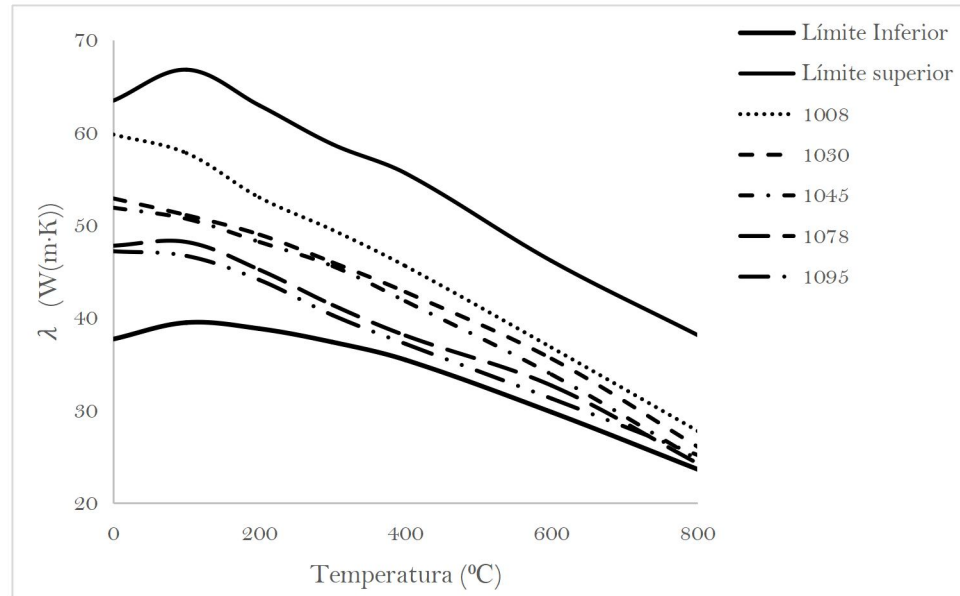


Figura 3.7. Intervalo de predicción para conductividad térmica, grupo 1.

3.4 Aplicabilidad de los modelos. Software ThermalSteel

Los modelos matemáticos propuestos son, evidentemente, de complejo empleo para fines prácticos de cálculo en la práctica. Con el fin de que puedan usarse de forma fácil e intuitiva los modelos obtenidos, se crea por el autor de esta investigación el software ThermalSteel_1.0.

Como se muestra en la figura 3.8, la única pantalla de este software solicita la selección del material mediante una lista desplegable, se encuentran disponibles las 32 marcas de aceros AISI en las que se han realizado las mediciones experimentales. Concluido este paso deberán introducirse los valores de composición química en % según los límites que se establecen por el software de forma automática en dependencia del acero seleccionado.

Por último se deberá escribir la temperatura (en el rango de 0-800°C) a la cual se desea realizar la estimación y seleccionar de la próxima lista desplegable la propiedad que se quiere estimar. Una vez concluidos estos sencillos pasos solo de deberá oprimir el botón “CALCULAR” y se recibirá en un cuadro de diálogo el valor estimado de la propiedad según los valores introducidos. Resulta beneficioso además que se mostrará un gráfico que resume el comportamiento de la propiedad en función de la temperatura en el rango de 0-800°C, esto aporta valiosa información visual para quien emplee el software.

El software ha sido basado únicamente en el modelo KNN entrenado con la totalidad de la data, que como se ha demostrado anteriormente es el que menor incertidumbre basándose en los criterios establecidos en esta investigación, además el costo computacional se considera moderado. Al estar basado en código abierto (R) de ser necesario podrá ser modificado por usuarios que así lo estimen conveniente.

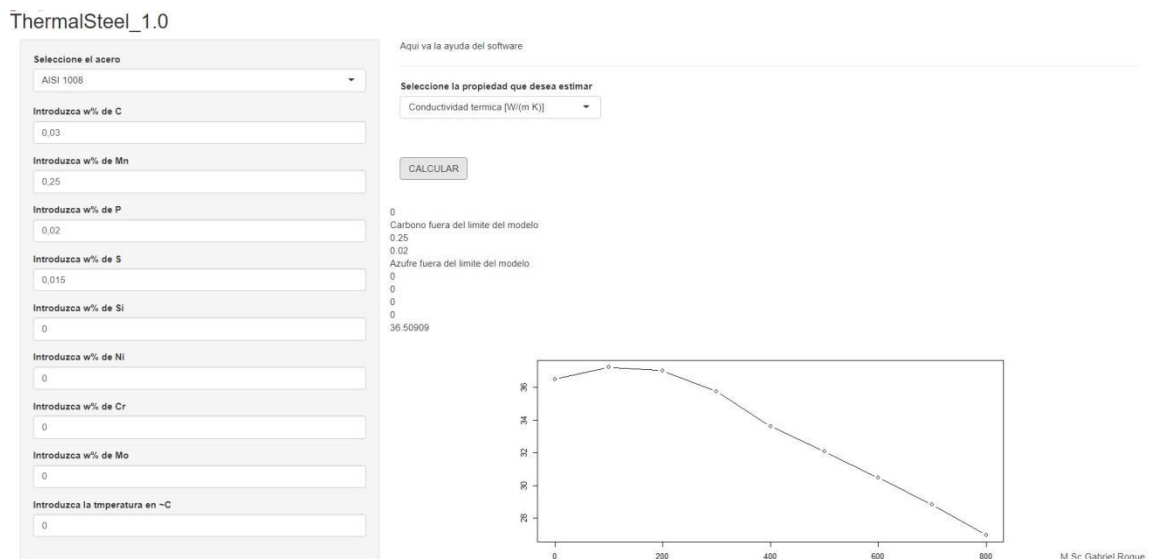


Figura 3.8. Pantalla del software ThermalSteel.

3.5 Conclusiones parciales del capítulo

Una vez finalizado el presente capítulo, se ha podido arribar a las siguientes conclusiones parciales:

1. El APF ofrece una incertidumbre varias veces mayor a la ofrecida por KNN y RNA, por lo que queda descartado su empleo. Todas las métricas empleadas para realizar la comparación de los modelos avalan que el modelo que ofrece la menor incertidumbre es el KNN; este se ha validado con datos de otros autores y se comprobó que existe similitud en magnitud y tendencia entre métricas empleadas para medir incertidumbre.
2. Se determina que en caso de requerir una menor incertidumbre que la ofrecida por el modelo KNN entrenado con la totalidad de los datos disponibles pueden emplearse modelos entrenados con datos de los grupos declarados. Se establece cuáles son los casos en que se puede explotar esta posibilidad y se especifica la magnitud de la disminución de la incertidumbre.
3. Se creó un software que permite emplear el modelo KNN de forma fácil en condiciones prácticas basado en el código abierto R. El costo computacional del mismo se considera moderado y es de uso intuitivo para especialistas afines con las propiedades termofísicas de los materiales.

CONCLUSIONES

Como resultado final del trabajo desarrollado, se ha podido arribar a las siguientes conclusiones:

1. A partir del procesamiento y generalización de datos experimentales fueron obtenidos modelos que son capaces de predecir propiedades termofísicas con adecuada incertidumbre para un amplio grupo de aceros, siendo más abarcadores que los registrados en la bibliografía.
2. De los modelos considerados, el que ofrece menor incertidumbre es el KNN, con un valor de RMSE entre 0,034 y 7,47, para los datos de entrenamiento y entre 0,1 y 8,2 para los datos de validación, tomados de la literatura especializada. A partir de lo anterior y teniendo en cuenta su eficiencia computacional, se seleccionó este modelo como el más conveniente para ser utilizado en la práctica.
3. Fue elaborado un software basado en código libre R que permite la aplicación en la práctica del modelo KNN, no se reportan herramientas similares en la bibliografía consultada. Con su empleo es posible realizar estimaciones rápidamente para la toma de decisiones respecto a la selección de aceros sometidos a suministros de calor y la evaluación de equipos en explotación.
4. A partir de los gráficos de incertidumbre en función de la temperatura elaborados y los intervalos de predicción calculados se facilita la comparación de los resultados predichos empleando KNN con mediciones en condiciones industriales para un amplio grupo de aceros.

RECOMENDACIONES

Basadas en las conclusiones obtenidas y para la extensión futura del presente trabajo, se realizan las siguientes recomendaciones:

1. Realizar la validación del software en la industria para predecir propiedades termofísicas, ya sea para la selección de materiales para nuevos equipos o para comprobar equipamiento en explotación.
2. Elaborar una versión del software que permita la introducción de nuevos datos para así ampliar su capacidad predictiva.
3. Potenciar en futuras investigaciones la inclusión de otras propiedades de interés en el software.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Abas, R. H. A., & Taieh, N. K. (2015). Experimental study of the thermal diffusivity and heat capacity concerning some duplex stainless steel. *Al-Khwarizmi Engineering Journal*, 11(2), 51-61.
- Adamczyk, W., Białocki, R., Orlande, H. R., & Ostrowski, Z. (2020). Nondestructive, real time technique for in-plane heat diffusivity measurements. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 154, 119659.
- Ahadi Akhlaghi, I., Salkhordeh Haghighi, M., Kahrobaee, S., & Hojati, M. (2020). Prediction of chemical composition and mechanical properties in powder metallurgical steels using multi-electromagnetic nondestructive methods and a data fusion system. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 498, 166246. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2019.166246>
- Algarra, P. S. (2006). *Métodos estadísticos aplicados* (Vol. 311): Edicions Universitat Barcelona.
- Alvaredo, P., Bruna, P., Crespo, D., & Gordo, E. (2018). Influence of carbon content on microstructure and properties of a steel matrix cermet. *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*, 75, 78-84. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijrmhm.2018.04.006>
- Ares, A., Caram, R., Jaime, M., Ferrandini, P., Dutra, A., Guejiman, S., & Schvezov, C. (2005). *Solidificación y microestructura de un acero inoxidable austenítico*. Paper presented at the ANALES AFA.
- Arriola, L., & Hyman, J. M. (2009). Sensitivity analysis for uncertainty quantification in mathematical models *Mathematical and statistical estimation approaches in epidemiology* (pp. 195-247): Springer.
- Ashong, A. N., Na, M. Y., Kim, H. C., Noh, S. H., Park, T., Chang, H. J., & Kim, J. H. (2019). Influence of manganese on the microstructure and mechanical properties of oxide-dispersion-strengthened steels. *Materials & Design*, 182, 107997. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2019.107997>
- Askeland, D. R., Fulay, P. P., & Wright, W. J. (2017). *Ciencia e ingeniería de materiales: Cengage learning*.
- ASTM. (2017). Standard Test Method for Thermal Conductivity of Solids by Means of the Guarded-Comparative-Longitudinal Heat Flow Technique *Philadelphia*.
- Bauccio, M. (1993). *ASM metals reference book*: ASM international.

- Beyerlein, K. R. (2013). A review of Debye function analysis. *Powder diffraction*, 28(S2), S2-S10.
- Borisade, S. G., Ajibola, O. O., Adebayo, A. O., & Oyetunji, A. (2020). Development of mathematical models for the prediction of mechanical properties of low carbon steel (LCS). *Materials Today: Proceedings*. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.134>
- Bouissa, Y., Shahriari, D., Champlaud, H., & Jahazi, M. (2019). Prediction of heat transfer coefficient during quenching of large size forged blocks using modeling and experimental validation. *Case Studies in Thermal Engineering*, 13, 100379.
- Boyer, H. E., & Gall, T. L. (2006). *Metals handbook*; desk edition.
- Bringas, J. E. (2002). *Handbook of comparative world steel standards*.
- Bronshtein, I., & Semendiaev, K. (1973). *Manual de matemáticas para ingenieros y estudiantes*: Mir.
- Buberger, J., Kersten, A., Kuder, M., Eckerle, R., Weyh, T., & Thiringer, T. (2022). Total CO₂-equivalent life-cycle emissions from commercially available passenger cars. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 159, 112158.
- Callister, W. D. (2019). *Ciencia e ingeniería de los materiales*: Reverté.
- Camaraza-Medina, Y., Hernandez-Guerrero, A., & Luviano-Ortiz, J. L. (2022). Experimental study on influence of the temperature and composition in the steels thermo physical properties for heat transfer applications. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*, 1-17.
- Carr, E. J. (2019). Rear-surface integral method for calculating thermal diffusivity from laser flash experiments. *Chemical Engineering Science*, 199, 546-551. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ces.2019.01.014>
- Carson, J. K. (2022). Modelling thermal diffusivity of heterogeneous materials based on thermal diffusivities of components with implications for thermal diffusivity and thermal conductivity measurement. *International Journal of Thermophysics*, 43(7), 108.
- Cengel, Y. A., & Boles, M. A. (2007). *Thermodynamics: An Engineering Approach* (6th Editon ed.): The McGraw-Hill Companies, Inc., New York.
- Chen, J., Xu, X., Zhou, J., & Li, B. (2022). Interfacial thermal resistance: Past, present, and future. *Reviews of Modern Physics*, 94(2), 025002.
- Chen, L., Wu, L., Hong, R., Zhang, K., & Wang, M. (2020). *Revisiting graph based collaborative filtering: A linear residual graph convolutional network approach*.

Paper presented at the Proceedings of the AAAI conference on artificial intelligence.

- Chunbao Charles, X., & Cang, D.-q. (2010). A brief overview of low CO₂ emission technologies for iron and steel making. *Journal of Iron and Steel Research, International*, 17(3), 1-7.
- Chung, D. (2001). Materials for thermal conduction. *Applied thermal engineering*, 21(16), 1593-1605.
- Conejo, A. N., Birat, J.-P., & Dutta, A. (2020). A review of the current environmental challenges of the steel industry and its value chain. *Journal of environmental management*, 259, 109782.
- Correa-Baena, J.-P., Hippalgaonkar, K., van Duren, J., Jaffer, S., Chandrasekhar, V. R., Stevanovic, V., . . . Buonassisi, T. (2018). Accelerating Materials Development via Automation, Machine Learning, and High-Performance Computing. *Joule*, 2(8), 1410-1420. doi: <https://doi.org/10.1016/j.joule.2018.05.009>
- Corsan, J., & Mitchem, N. (1979). The specific heat of fifteen stainless steels in the temperature range 4K-30K. *Cryogenics*, 19(1), 11-16.
- Dadé, M., Malaplate, J., Brachet, J. C., Guilbert, T., & Toffolon-Masclet, C. (2019). Influence of chemical composition on the microstructure and phase transformations of Fe-14Cr ferritic steels. *Materialia*, 7, 100388. doi: <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2019.100388>
- Derazkola, H. A., Eyvazian, A., & Simchi, A. (2020). Submerged friction stir welding of dissimilar joints between an Al-Mg alloy and low carbon steel: Thermo-mechanical modeling, microstructural features, and mechanical properties. *Journal of Manufacturing Processes*, 50, 68-79.
- Dong, G., Li, X., Zhao, J., Su, S., Misra, R., Xiao, R., & Shang, C. (2020). Machine learning guided methods in building chemical composition-hardenability model for wear-resistant steel. *Materials Today Communications*, 24, 101332.
- Du Chatenier, F., Boerstael, B., & De Nobel, J. (1965). Specific heat capacity of a stainless steel. *Physica*, 31(7), 1061-1062.
- Du, J. L., Feng, Y. L., & Zhang, M. (2021). Construction of a machine-learning-based prediction model for mechanical properties of ultra-fine-grained Fe-C alloy. *Journal of Materials Research and Technology*, 15, 4914-4930.
- ElSheikh, A., Barakat, N., Abu-Nabah, B. A., & Hamdan, M. O. (2022). Thermal diffusivity estimation in metallic alloys using a one-dimensional flux-based thermography. *Infrared Physics & Technology*, 127, 104411.

- Eser, E., & Koç, H. (2016). Investigations of temperature dependences of electrical resistivity and specific heat capacity of metals. *Physica B: Condensed Matter*, 492, 7-10. doi: <https://doi.org/10.1016/j.physb.2016.03.032>
- Ettini, K., Cotter, J., & Guldiken, R. (2022). Analytical, Simulation, and Experimental Verification of Ultrasonic Thermometry Technique. *Available at SSRN 4198902*.
- Fang, H., Wong, M., & Bai, Y. (2015). Use of kinetic model for thermal properties of steel at high temperatures. *Australian Journal of Civil Engineering*, 13(1), 40-47.
- Fausett, L. V. (2006). *Fundamentals of neural networks: architectures, algorithms and applications*: Pearson Education India.
- Fernández-Columbié, T., Rodríguez-González, I., Cobas-Suárez, M. Á., Aldana-Cruz, M., Utria-Jiménez, M., & Medina-Arce, M. (2019). Microestructura de una aleación níquel-cromo-molibdeno soldada con electrodos revestidos. *Minería y Geología*, 35(2), 220-232.
- Ferreira-Oliveira, J., De Lucena, L., Dos Reis, R., De Araújo, C., & Bezerra-Filho, C. (2022). Thermal diffusivity measurement of stainless-steel alloys through use of the Angstrom's method. *Experimental Heat Transfer*, 35(4), 419-439.
- Fu, J., Davis, T. P., Kumar, A., Richardson, I. M., & Hermans, M. J. M. (2021). Characterisation of the influence of vanadium and tantalum on yttrium-based nano-oxides in ODS Eurofer steel. *Materials Characterization*, 175, 111072. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matchar.2021.111072>
- Fukuyama, H., Higashi, H., & Yamano, H. (2022). Normal spectral emissivity, specific heat capacity, and thermal conductivity of type 316 austenitic stainless steel containing up to 10 mass% B4C in a liquid state. *Journal of Nuclear Materials*, 568, 153865. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2022.153865>
- Fultz, B. (2010). Vibrational thermodynamics of materials. *Progress in Materials Science*, 55(4), 247-352.
- Galimberti, M., Cimini, C., Copani, G., Malfa, E., & Cavalieri, S. (2022). Technologies and challenges for sustainable steel production: an overview. ... *SUMMER SCHOOL FRANCESCO TURCO. PROCEEDINGS*, 27, 1-7.
- Gao, T., Ying, L., Dai, M., Shen, G., Hu, P., & Shen, L. (2019). A comparative study of temperature-dependent interfacial heat transfer coefficient prediction methods for 22MnB5 steel in spray quenching process. *International Journal of Thermal Sciences*, 139, 36-60. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijthermalsci.2018.12.041>
- Ghrib, T., Boubaker, K., & Bouhaf, M. (2008). Investigation of thermal diffusivity–microhardness correlation extended to surface-nitrured steel using Boubaker polynomials expansion. *Modern Physics Letters B*, 22(29), 2893-2907.

- Gramlich, A., van der Linde, C., Ackermann, M., & Bleck, W. (2020). Effect of molybdenum, aluminium and boron on the phase transformation in 4 wt.-% manganese steels. *Results in Materials*, 8, 100147. doi: <https://doi.org/10.1016/j.rinma.2020.100147>
- Guo, S., Yu, J., Liu, X., Wang, C., & Jiang, Q. (2019). A predicting model for properties of steel using the industrial big data based on machine learning. *Computational Materials Science*, 160, 95-104. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2018.12.056>
- Guo, Y., Wang, K., & Song, S. (2020). Abnormal influence of impurity element phosphorus on the hot ductility of SA508Gr.4N reactor pressure vessel steel. *Materials Science and Engineering: A*, 792, 139837. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2020.139837>
- Guo, Z., Saunders, N., Miodownik, P., & Schillé, J.-P. (2008). Modeling material properties of lead-free solder alloys. *Journal of electronic materials*, 37(1), 23-31.
- Guo, Z., & Sha, W. (2004). Modelling the correlation between processing parameters and properties of maraging steels using artificial neural network. *Computational Materials Science*, 29(1), 12-28. doi: [https://doi.org/10.1016/S0927-0256\(03\)00092-2](https://doi.org/10.1016/S0927-0256(03)00092-2)
- He, Z., Yang, H., He, Y., Zheng, W., Guan, Z., & Li, L. (2020). Influence of manganese on deformation behavior of lightweight steel at different strain rate. *Journal of Materials Research and Technology*, 9(5), 11611-11621. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.08.020>
- Hernandez-Duran, E. I., Corallo, L., Ros-Yanez, T., Castro-Cerda, F. M., & Petrov, R. H. (2021). Influence of Mo–Nb–Ti additions and peak annealing temperature on the microstructure and mechanical properties of low alloy steels after ultrafast heating process. *Materials Science and Engineering: A*, 808, 140928. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2021.140928>
- Hirsch, J., Leroy, C., & Green, A. (2023). AluMATTER, a New Interactive e-Learning Tool. from <http://aluminium.matter.org.uk>.
- Holman, J. P. (2008). *Heat Transfer (Si Units) Sie*: Tata McGraw-Hill Education.
- Hu, J., Zhang, Y., Yang, X., Li, H., Xu, H., Ma, C., . . . Yao, Z. (2018). Effect of pack-chromizing temperature on microstructure and performance of AISI 5140 steel with Cr-coatings. *Surface and Coatings Technology*, 344, 656-663. doi: <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2018.03.099>
- Hu, N., Chiang, S. W., Yi, J., Li, X., Li, J., Du, H., . . . Kang, F. (2015). Prediction of interfacial thermal resistance of carbon fiber in one dimensional fiber-reinforced composites using laser flash analysis. *Composites Science and Technology*, 110, 69-75. doi: <https://doi.org/10.1016/j.compscitech.2015.01.025>

- Hua, G., Li, C., Cheng, X., Zhao, X., Feng, Q., Li, Z., . . . Szpunar, J. A. (2018). First-principles study on influence of molybdenum on acicular ferrite formation on TiC particles in microalloyed steels. *Solid State Communications*, *269*, 102-107. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2017.10.001>
- Izaurieta, F., & Saavedra, C. (2000). Redes neuronales artificiales. *Departamento de Física, Universidad de Concepción Chile*.
- Jafarian, H. R., Sabzi, M., Mousavi Anijdan, S. H., Eivani, A. R., & Park, N. (2021). The influence of austenitization temperature on microstructural developments, mechanical properties, fracture mode and wear mechanism of Hadfield high manganese steel. *Journal of Materials Research and Technology*, *10*, 819-831. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2020.12.003>
- Jiménez-Sánchez, D., & Arzola-Ruiz, J. (2017). Redes neuronales regularizadas aplicadas a la estimación de propiedades mecánicas de perfiles de acero. *Ingeniería Mecánica*, *20*(3), 115-121.
- Juan, Y., Dai, Y., Yang, Y., & Zhang, J. (2021). Accelerating materials discovery using machine learning. *Journal of Materials Science & Technology*, *79*, 178-190.
- Jung, I. D., Shin, D. S., Kim, D., Lee, J., Lee, M. S., Son, H. J., . . . Sung, H. (2020). Artificial intelligence for the prediction of tensile properties by using microstructural parameters in high strength steels. *Materialia*, *11*, 100699. doi: <https://doi.org/10.1016/j.mtla.2020.100699>
- Kalup, M. A., Beňo, J., Zlá, S., & Drozdová, E. (2017). Linear Coefficient of Thermal Expansion and Density of Steel Obtained Using Thermo-mechanical Analysis, Dilatometry and Calculations.
- Ke, X., Ye, J., Pan, Z., Geng, J., Besser, M. F., Qu, D., . . . Wang, Y. M. (2019). Ideal maximum strengths and defect-induced softening in nanocrystalline-nanotwinned metals. *Nature materials*, *18*(11), 1207-1214.
- Kumaraswamy, J., Kumar, V., & Purushotham, G. (2022). Evaluation of the microstructure and thermal properties of (ASTM A 494 M grade) nickel alloy hybrid metal matrix composites processed by sand mold casting. *International Journal of Ambient Energy*, *43*(1), 4899-4908.
- Kurgan, N. (2014). Effect of porosity and density on the mechanical and microstructural properties of sintered 316L stainless steel implant materials. *Materials & Design*, *55*, 235-241.
- Kwon, O. (1992). A technology for the prediction and control of microstructural changes and mechanical properties in steel. *ISIJ international*, *32*(3), 350-358.
- Lee, T., & Taylor, R. (1978). Thermal diffusivity of dispersed materials.

- Leibowitz, L., & Blomquist, R. (1988). Thermal conductivity and thermal expansion of stainless steels D9 and HT9. *International Journal of Thermophysics*, 9, 873-883.
- Li, D., Feng, Y., Song, S., Liu, Q., Bai, Q., Ren, F., & Shangguan, F. (2015). Influences of silicon on the work hardening behavior and hot deformation behavior of Fe–25wt%Mn–(Si, Al) TWIP steel. *Journal of Alloys and Compounds*, 618, 768-775. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2014.08.239>
- Li, H., Li, Y., Huang, J., Shen, C., Wang, C., Jing, T., . . . Xu, W. (2022). Physical metallurgy guided industrial big data analysis system with data classification and property prediction. *steel research international*, 93(8), 2100820.
- Li, X., Wei, Y., Lu, L., Lu, K., & Gao, H. (2010). Dislocation nucleation governed softening and maximum strength in nano-twinned metals. *Nature*, 464(7290), 877-880.
- Lienert, T. J., Babu, S. S., Acoff, V. L., Zhou, N. Y., DeGuire, E., Lampman, S., . . . Riley, B. (2011). ASM handbook. *Welding Fundamentals and Processes*, 6.
- Liu, Y., Li, H., Huang, S., An, H., Santagata, R., & Ulgiati, S. (2020). Environmental and economic-related impact assessment of iron and steel production. A call for shared responsibility in global trade. *Journal of Cleaner Production*, 269, 122239.
- Liu, Y., Zhu, J.-c., & Cao, Y. (2017). Modeling effects of alloying elements and heat treatment parameters on mechanical properties of hot die steel with back-propagation artificial neural network. *Journal of Iron and Steel Research International*, 24(12), 1254-1260.
- López, R. F., & Fernandez, J. M. F. (2008). *Las redes neuronales artificiales: Netbiblo*.
- Lunev, A., Zborovskii, V., Aliev, T., Heymer, R., & Vilkhivskaya, O. (2020). PULsE: An open-source software for laser flash analysis. *Software Impacts*, 6, 100044. doi: <https://doi.org/10.1016/j.simpa.2020.100044>
- Machado, H. D., Toda-Caraballo, I., Garcia-Mateo, C., & Aristizábal-Sierra, R. (2021). Modelling the formation of austenite in the intercritical interval in ductile iron. *Journal of Materials Research and Technology*. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmrt.2021.12.072>
- Magnus, W., & Winkler, S. (2013). *Hill's equation: Courier Corporation*.
- Malinowski, Z., Telejko, T., Hadała, B., Cebo-Rudnicka, A., & Szajding, A. (2014). Dedicated three dimensional numerical models for the inverse determination of the heat flux and heat transfer coefficient distributions over the metal plate surface cooled by water. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 75, 347-361.
- Marshall, P. (1984). Austenitic stainless steels: microstructure and mechanical properties.

- Martínez-Pérez, Y. E., Collazo-Carceller, R., Autie-Pérez, M. A., & Valín-Rivera, J. L. (2021). Modelación de propiedades y transformaciones de fase a altas temperaturas de aceros 2.25 Cr-1Mo. *Ingeniería Mecánica*, 24(1), 46-54.
- MatWeb. (2022). MatWeb. Retrieved 12, 2022, from <https://www.matweb.com/>
- Medina, Y. C. (2020). *Introducción a la termotransferencia*: Editorial Universitaria (Cuba).
- Mehmetoglu, T. (2019). Use of Einstein-Debye method in the analytical and semi empirical analysis of isobaric heat capacity and thermal conductivity of nuclear materials. *Journal of Nuclear Materials*, 527, 151827. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jnucmat.2019.151827>
- Meng, T. X., Guo, Q., Xi, W., Ding, W. Q., Liu, X. Z., Lin, N. M., . . . Liu, X. P. (2018). Effect of surface etching on the oxidation behavior of plasma chromizing-treated AISI440B stainless steel. *Applied Surface Science*, 433, 855-861. doi: <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2017.10.111>
- Miranda, G., Faria, S., Bartolomeu, F., Pinto, E., Madeira, S., Mateus, A., . . . Carvalho, O. (2016). Predictive models for physical and mechanical properties of 316L stainless steel produced by selective laser melting. *Materials Science and Engineering: A*, 657, 43-56.
- Miranda, J. (2001). Evaluación de la incertidumbre en datos experimentales. *Instituto de Física, UNAM, Méexico*.
- Mizukami, H., Shirai, Y., Yamanaka, A., & Watanabe, T. (2000). Prediction of density of stainless steel. *ISIJ international*, 40(10), 987-994.
- Mizukami, H., Yamanaka, A., & Watanabe, T. (2002). Prediction of density of carbon steels. *ISIJ international*, 42(4), 375-384.
- Montgomery, D. C., Peck, E. A., & Vining, G. G. (2021). *Introduction to linear regression analysis*: John Wiley & Sons.
- Moreno, J. M. (2002). Redes neuronales artificiales aplicadas al análisis de datos. *Doctorado Psicología, Facultad de Psicología, Tesis doctoral de la Facultad de Psicología, Universitat de Les Illes Balears, Palma de Mallorca, España*.
- Moro, L., Gonzalez, G., Brizuela, G., Juan, A., & Simonetti, S. (2008). Influence of chromium and vanadium in the mechanical resistance of steels. *Materials Chemistry and Physics*, 109(2), 212-216. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matchemphys.2007.11.030>
- Nacelle, A., & Mizraji, E. (2009). Redes neuronales artificiales. *Núcleo de ingeniería biomédica–Universidad de la Republica Uruguay*.

- Narayana, P. L., Lee, S. W., Park, C. H., Yeom, J.-T., Hong, J.-K., Maurya, A. K., & Reddy, N. S. (2020). Modeling high-temperature mechanical properties of austenitic stainless steels by neural networks. *Computational Materials Science*, *179*, 109617. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2020.109617>
- Nathan, A. M. (1951). A dynamic method for measuring the specific heat of metals. *Journal of Applied Physics*, *22*(2), 234-235.
- Nickel, J., Baak, N., Biermann, D., & Walther, F. (2018). Influence of the deep hole drilling process and sulphur content on the fatigue strength of AISI 4140 steel components. *Procedia CIRP*, *71*, 209-214. doi: <https://doi.org/10.1016/j.procir.2018.05.069>
- Ning, J., Zhang, H.-B., Chen, S.-M., Zhang, L.-J., & Na, S. J. (2022). Intensive laser repair through additive manufacturing of high-strength martensitic stainless steel powders (II): evaluation of intensive repair ability of high strength martensitic steel powder based on Schaeffler diagram. *Journal of Materials Research and Technology*, *16*, 1494-1507.
- Nolte, P., Malvisalo, T., Wagner, F., & Schweizer, S. (2017). Thermal diffusivity of metals determined by lock-in thermography. *Quantitative InfraRed Thermography Journal*, *14*(2), 218-225.
- Norkett, J. E., Semple, J. K., Bechetti, D. H., Zhang, W., & Fisher, C. R. (2023). Naval Surface Warfare Center Carderock Division.
- Otero-de-la-Roza, A., Abbasi-Pérez, D., & Luaña, V. (2011). Gibbs2: A new version of the quasiharmonic model code. II. Models for solid-state thermodynamics, features and implementation. *Computer Physics Communications*, *182*(10), 2232-2248.
- Pacyna, J., & Dąbrowski, R. (2006). Vanadium influence upon changes at tempering steels of small content of other elements. *Journal of Materials Processing Technology*, *175*(1), 330-333. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2005.04.057>
- Palma, R. P. (2022). Análisis crítico del coeficiente de determinación (R²), como indicador de la calidad de modelos lineales y no lineales. *Matemática*, *20*(2).
- Parker, W., Jenkins, R., Butler, C., & Abbott, G. (1961). Flash method of determining thermal diffusivity, heat capacity, and thermal conductivity. *Journal of Applied Physics*, *32*(9), 1679-1684.
- Paulic, M., Mocnik, D., Ficko, M., Balic, J., Irgolic, T., & Klancnik, S. (2015). Intelligent system for prediction of mechanical properties of material based on metallographic images. *Tehnički vjesnik*, *22*(6), 1419-1424.

- Peet, M. J., Hasan, H. S., & Bhadeshia, H. K. D. H. (2011). Prediction of thermal conductivity of steel. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54(11), 2602-2608. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.01.025>
- Peña, D. (2002). *Análisis de datos multivariantes* (Vol. 24): McGraw-hill Madrid.
- Piekarska, W., & Goszczyńska-Króliszewska, D. (2017). Analytical Methods of Predicting the Structure and Mechanical Properties of High Tensile Strength Steel. *Procedia Engineering*, 177, 92-98. doi: <https://doi.org/10.1016/j.proeng.2017.02.189>
- Raghavan, V. (1995). Effect of manganese on the stability of austenite in Fe-Cr-Ni alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 26(2), 237-242.
- Rana, R. (2014). Low-density steels. *Jom*, 66(9), 1730-1733.
- Reddy, N. S., Krishnaiah, J., Hong, S.-G., & Lee, J. S. (2009). Modeling medium carbon steels by using artificial neural networks. *Materials Science and Engineering: A*, 508(1), 93-105. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2008.12.022>
- Rodrigo, J. A. (2018). *Machine Learning con R y caret*.
- Rodríguez, G. P., Arenas, A. C., Hernández, R. A. M., Stolik, S., Orea, A. C., & Sinencio, F. S. (2002). Measurement of thermal diffusivity of bone, hydroxyapatite and metals for biomedical application. *Analytical Sciences/Supplements*, 17(0), s357-s360.
- Roque-Villalonga, G., & Camaraza-Medina, Y. (2022). Empirical modeling of thermal conductivity for a group of steels. *Dyna*, 89(224).
- Rowe, S. C., Chubukov, B. A., & Telotte, J. C. (2022). A Hill Equation for Solid Specific Heat Capacity Calculation. *ChemEngineering*, 6(4), 56.
- Salas, Z. P. F., & Magdaleón, F. D. (2009a). INFLUENCIA DEL CARBONO EN LAS PROPIEDADES DEL ACERO PARA REFUERZO DE HORMIGÓN. *Tecnología Química*, 29, 60-69.
- Salas, Z. P. F., & Magdaleón, F. D. (2009b). INFLUENCIA DEL CARBONO EN LAS PROPIEDADES DEL ACERO PARA REFUERZO DE HORMIGÓN. *Tecnología Química*, 29, 60-69.
- Shackelford, J. F., Güemes, A., & Martín, M. P. (2010). *Introducción a la ciencia de materiales para ingenieros*: Pearson educación.
- Şimşir, C., & Gür, C. H. (2008). A FEM based framework for simulation of thermal treatments: Application to steel quenching. *Computational Materials Science*, 44(2), 588-600. doi: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.04.021>

- Siyasiya, C. W., & Stumpf, W. E. (2008). The influence of sulphur content on the static recrystallisation of cold worked low carbon aluminium-killed strip steels. *Materials Science and Engineering: A*, 494(1), 188-195. doi: <https://doi.org/10.1016/j.msea.2008.04.013>
- Smith, W. F., Hashemi, J., Cázares, G. N., & González-Caver, P. A. (2006). *Fundamentos de la ciencia e ingeniería de materiales*: McGraw-Hill México, DF.
- Somasundharam, S., & Reddy, K. S. (2020). Inverse analysis for simultaneous estimation of temperature dependent thermal properties of isotropic materials. *Thermal Science and Engineering Progress*, 20, 100728. doi: <https://doi.org/10.1016/j.tsep.2020.100728>
- STUDIES, E. (2022). Steel Statistical Yearbook. *World Steel Association, Brussels*.
- Suenaga, K. (2021). The Influence of Science and “Industrial Enlightenment” on Steelmaking, 1786–1856. *Innovation, Catch-up and Sustainable Development: A Schumpeterian Perspective*, 9-27.
- Sugianto, A., Narazaki, M., Kogawara, M., & Shirayori, A. (2009). A comparative study on determination method of heat transfer coefficient using inverse heat transfer and iterative modification. *Journal of Materials Processing Technology*, 209(10), 4627-4632. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2008.10.016>
- Sun, B., Fazeli, F., Scott, C., Brodusch, N., Gauvin, R., & Yue, S. (2018). The influence of silicon additions on the deformation behavior of austenite-ferrite duplex medium manganese steels. *Acta Materialia*, 148, 249-262. doi: <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2018.02.005>
- Sun, Y., Zeng, W., Han, Y., Zhao, Y., Wang, G., Dargusch, M. S., & Guo, P. (2011). Modeling the correlation between microstructure and the properties of the Ti–6Al–4V alloy based on an artificial neural network. *Materials Science and Engineering: A*, 528(29-30), 8757-8764.
- Telejko, T. (2004). Analysis of an inverse method of simultaneous determination of thermal conductivity and heat of phase transformation in steels. *Journal of Materials Processing Technology*, 155-156, 1317-1323. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmatprotec.2004.04.185>
- Thibault, J., & Grandjean, B. P. A. (1991). A neural network methodology for heat transfer data analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(8), 2063-2070. doi: [https://doi.org/10.1016/0017-9310\(91\)90217-3](https://doi.org/10.1016/0017-9310(91)90217-3)
- Toberer, E. S., Baranowski, L. L., & Dames, C. (2012). Advances in thermal conductivity. *Annual Review of Materials Research*, 42, 179-209.

- Touloukian, Y., & Makita, T. (1970). Thermophysical properties of matter-the TPRC data series. volume 6. specific heat-nonmetallic liquids and gases. *Thermophysical and electronic properties information analysis center lafayette in.*
- Tritt, T. M. (2005). *Thermal conductivity: theory, properties, and applications*: Springer Science & Business Media.
- Tsukada, T., Fukuyama, H., & Kobatake, H. (2007). Determination of thermal conductivity and emissivity of electromagnetically levitated high-temperature droplet based on the periodic laser-heating method: Theory. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 50(15), 3054-3061. doi: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2006.12.026>
- Turichin, G., Kuznetsov, M., Klimova-Korsmik, O., Sklyar, M., Zhitenev, A., Kurakin, A., & Pozdnyakov, A. (2018). Laser-Arc hybrid welding perspective ultra-high strength steels: influence of the chemical composition of weld metal on microstructure and mechanical properties. *Procedia CIRP*, 74, 752-756. doi: <https://doi.org/10.1016/j.procir.2018.08.017>
- Valencia, J. J., & Queded, P. (2001). Thermophysical properties. *Modeling for casting and solidification processing*, 189.
- Varga, I. (2022). Semiclassical and thermal phase space entropies measuring complexity. *Journal of Mathematical Chemistry*, 1-11.
- Villalonga, G. R., Medina, Y. C., Morales, O. F. G., Mediaceja, Y. R., & Gonzalez, A. M. R. (2023). Modelación empírica de propiedades termofísicas de aceros inoxidables austeníticos//Empirical modelation of thermophysical properties of austenitic stainless steel. *Ingeniería Mecánica*, 26(1), e661-e661.
- Wang, C., Ma, R., Zhou, Y., Liu, Y., Daniel, E. F., Li, X., . . . Ke, W. (2021). Effects of rare earth modifying inclusions on the pitting corrosion of 13Cr4Ni martensitic stainless steel. *Journal of Materials Science & Technology*. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmst.2021.03.014>
- Wang, G.-h., & Li, Y.-x. (2020). Thermal conductivity of cast iron-A review. *China Foundry*, 17, 85-95.
- Wang, G., & Li, Y. (2019). Effects of alloying elements and temperature on thermal conductivity of ferrite. *Journal of Applied Physics*, 126(12), 125118.
- Wang, N., Kaur, I., Singh, P., & Li, L. (2021). Prediction of effective thermal conductivity of porous lattice structures and validation with additively manufactured metal foams. *Applied thermal engineering*, 187, 116558. doi: <https://doi.org/10.1016/j.applthermaleng.2021.116558>

- Wang, W., & Lu, Y. (2018). *Analysis of the mean absolute error (MAE) and the root mean square error (RMSE) in assessing rounding model*. Paper presented at the IOP conference series: materials science and engineering.
- Wang, Z.-L., & Adachi, Y. (2019). Property prediction and properties-to-microstructure inverse analysis of steels by a machine-learning approach. *Materials Science and Engineering: A*, 744, 661-670.
- Xie, Q., Suvarna, M., Li, J., Zhu, X., Cai, J., & Wang, X. (2021). Online prediction of mechanical properties of hot rolled steel plate using machine learning. *Materials & Design*, 197, 109201. doi: <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2020.109201>
- Xing, Y., Wang, W., & Al-azzani, H. (2021). Assessment of thermal properties of various types of high-strength steels at elevated temperatures. *Fire Safety Journal*, 103348. doi: <https://doi.org/10.1016/j.firesaf.2021.103348>
- Yafei, S., Yongjun, T., Jing, S., & Dongjie, N. (2009). *Effect of temperature and composition on thermal properties of carbon steel*. Paper presented at the 2009 Chinese Control and Decision Conference.
- Yang, Y. (2007). Thermal conductivity. *Physical properties of polymers handbook*, 155-163.
- Yikang, X. A. Z. D. W. (1999). IMPURITIES IN STEEL AND THEIR INFLUENCE ON STEEL PROPERTIES [J]. *IRON AND STEEL*, 10.
- Zhang, J., Chen, H., Fan, D., Huang, J., Yu, X., Feng, W., & Xu, K. (2019). Effects of phosphorus impurity on the microstructure and impact toughness of weld joint for the 12Cr2Mo1R heat resistant steel. *Journal of Manufacturing Processes*, 38, 453-461. doi: <https://doi.org/10.1016/j.jmapro.2019.01.026>
- Zheng, Q., Hao, M., Miao, R., Schaadt, J., & Dames, C. (2021). Advances in thermal conductivity for energy applications: a review. *Progress in Energy*, 3(1), 012002.
- Zhu, Q., Huang, Q., Tian, Y., Zhao, S., Chen, Y., Cao, G., . . . Zhang, Z. (2022). Hierarchical twinning governed by defective twin boundary in metallic materials. *Science Advances*, 8(20), eabn8299.
- Zurada, J. (1992). *Introduction to artificial neural systems*: West Publishing Co.

ANEXOS

Anexo 1. Aval



Summary of the experimental study "Influence of temperature and composition on the variation of thermo-physical properties of steel".

Name(s) and Surnames of the advisor: Ph.D. Ali A. Kolski Jamal & Ph.D. Hislan M. Kiyasattfar Khandy

Linked to the scientific institution: Department of Mechanical Engineering, School of Engineering and Applied Sciences, Khazar University.

Located in: Baku, Azerbaijan.

Date: January 16, 2022

Description of the materials and analysis methods used.

The made tests in the experimental study are based on the Laser Flash Analysis (LFA) technique, evaluating six thermo physical properties (thermal conductivity, specific heat, thermal diffusivity, electrical resistivity, electrical conductivity and linear thermal expansion). The density values were obtained by estimation from the existing relationship with measured properties. 97 individual samples of 37 classifications (annealed and rolled steels) AISI-SAE (1008, 1030, 1045, 1078, 1095, 1145, 1345, 1524, 201, 205, 2330, 2515, 301, 302, 316, 316, 347, 384, 4028, 405, 410, 4130, 4140, 420, 430, 4320, 446, 4626, 5132, 5140, 6150, 8115, 8617, 8637 and 8652) were analyzed. The temperature was varied in a range from 0 to 800°C.

Three basic dimensions (diameter x length) were used in the samples tested, 3x3, 10x10 and 20x20 mm, with 13, 65 and 19 test respectively. Due to limitations of the kit models Linseis DIL L75 and Linseis Thin Film Analyzer-TFA 74, only samples 3x3 and 6x6 were used in the measurement of linear thermal expansion and electrical resistivity/conductivity. The fundamental technical characteristics of the facilities used are:

Thermophysical properties	Fundamentals parameters and technical characteristics
Thermal conductivity	Standards used: ASTM E1225-99, ASTM C 177, ASTM E220, ASTM E230, ASTM E1461, ASTM C714, ASTM D5470 Kit model: Linseis LZT-Meter (Germany, 2020) Accuracy: $\pm 4\%$ Repeatability: $\pm 3\%$ Temperature range: -125°C up to 2800°C Heating rate: 0.1 up to 50 °C Thermal Conductivity: 0.1 up to 4000 W/(mK)



	<p>Sample numbers: up to 3 samples</p> <p>Flash source: Ng:YAG 25 J/pulse (variable pulse energy: software controlled)</p> <p>Vision control: Pulse width: 0.05 up to 5 ms (Perfect field of view)</p> <p>IR-detector: InSb: RT up to 2000 /2800°C and MCT: –100 up to 900°C. Data acquisition: 2 MHz</p> <p>Gas control: manual or MFC gas dosing systems</p>
<p>Specific heat</p> <p>Thermal diffusivity</p>	<p>Standards used: DIN EN 821, BS EN 1159-2, ISO 830, DIN EM 12667, JIS A 1412.</p> <p>Kit model: Linseis LFA 1000 (Germany, 2020)</p> <p>Specific heat: Accuracy: $\pm 5\%$ Repeatability: $\pm 3\%$</p> <p>Thermal diffusivity: Accuracy: $\pm 2.3\%$ Repeatability: $\pm 1.9\%$</p> <p>Temperature range: -125°C up to 2000°C</p> <p>Heating rate: 0.01 up to 50 °C</p> <p>Specific heat: 0.1 up to 1500 (J/kg K)</p> <p>Thermal diffusivity: 0.005 up to 000 mm²/s</p> <p>Sample numbers: up to 3 samples</p> <p>Flash source: Ng:YAG 25 J/pulse (variable pulse energy: software controlled)</p> <p>Vision control: Pulse width: 0.05 up to 5 ms (Perfect field of view)</p> <p>IR-detector: InSb: RT up to 2000 /2500°C and MCT: –100 up to 800°C. Data acquisition: 2 MHz</p> <p>Gas control: manual or MFC gas dosing systems</p>
<p>Linear thermal expansion</p>	<p>Standards used: DIN EN 13163, DIN EN 11487, ISO 8302</p> <p>Kit model: Linseis DIL L75 Quattro (Germany, 2019)</p> <p>Accuracy: $\pm 3,6\%$ Repeatability: $\pm 1,5\%$</p> <p>Temperature range: -125°C up to 1000°C</p> <p>Heating/cooling rates: 0.01K/min up to 50K/min (dependent on furnace) Sample numbers: up to 4 samples</p>



	Sample length max: 50mm Sample diameter max: 7mm Measuring range: 5 / 5000 μ m Resolution: 1.25 nm
Electrical resistivity	Standards used: DIN EN 12399, DIN EN 11448. Kit model: Linseis Thin Film Analyzer–TFA 74 (Germany, 2020) Electrical resistivity : Accuracy: $\pm 4.2\%$ Repeatability: $\pm 2.8\%$ Electrical conductivity: Accuracy: $\pm 5.1\%$ Repeatability: $\pm 2.3\%$ Temperature range: -100°C up to 1000°C Input current: 5 nA up to 125 mA
Electrical conductivity	Hall tension: 1 μV up to 2500 μV Max. resolution: 65 pV Permanent magnet: up to 0.70T Electro magnet: up to ± 1 T Hallbach magnet: up to 0.5 T Sample numbers: up to 3 samples Data acquisition: 2 MHz

All experimental data were obtained by Prof. Ph.D. Ali A. Kolski Jamal in his postdoctoral research under the guidance of Prof. Ph.D. Hislan M. Kiyasattfar Khandy. Given the excellent collaboration and research relations with Prof. Ph.D. Yanan Camaraza-Medina, we authorize the experimental data of our authorship for academic and research use, as long as the source is respected and acknowledged, and that its use does not generate competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work. If any matter in this regard is required, please contact us as soon as possible.

Best regards

Ph.D. Ali A. Kolski Jamal
Lecturer/Postdoctoral Researcher
School of Engineering and Applied
Sciences, Khazar University.
Baku, Azerbaijan,
Tel: (+994) 508822123
Email: aljamal.7485@gmail.com

Ph.D. Hislan M. Kiyasattfar Khandy.
Senior Lecturer
School of Engineering and Applied
Sciences, Khazar University.
Baku, Azerbaijan,
Tel: (+994) 508822112
Email: hislan.khandyh66@gmail.com

Anexo 2. Descripción estadística de la data.

Grupo de aceros al carbono sin aleación

1008

1008	Media	Desv.Est.	Varianza	Mínimo	Mediana	Máximo
C	0,083011	0,013750	0,000189	0,060000	0,080000	0,100000
Mn	0,36849	0,08084	0,00653	0,25000	0,38000	0,50000
P	0,025914	0,007659	0,000059	0,020000	0,020000	0,040000
S	0,039032	0,009631	0,000093	0,020000	0,040000	0,050000
Si	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Mo	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	49,468	10,535	110,993	25,000	50,200	75,600
C_p (J/kg·K)	566,87	78,05	6091,83	461,00	538,00	753,00
ρ (kg/m ³)	7897,5	18,5	342,3	7850,0	7898,0	7942,0
α (m ² /s)	1,1467	0,3442	0,1185	0,4600	1,1900	1,9200

1030

Variable	Media	Desv.Est.	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,31452	0,02063	0,000425	0,28000	0,31000	0,31000	0,34000	0,34000
Mn	0,73871	0,09655	0,00932	0,60000	0,75000	0,75000	0,75000	0,90000
P	0,025914	0,007659	0,000059	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,039032	0,009631	0,000093	0,020000	0,040000	0,040000	0,040000	0,050000
Si	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000

	0		0	0	0	0	0	0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	45,390	8,966	80,391	23,000	39,600	46,300	51,800	67,200
C_p (J/kg·K)	580,92	102,89	10586,9 0	466,00	514,00	543,00	619,00	838,00
ρ (kg/m ³)	7882,4	18,5	341,0	7835,0	7868,0	7883,0	7896,0	7927,0
α (m ² /s)	1,0395	0,3086	0,0952	0,3800	0,8200	1,0900	1,2700	1,6900

1045

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,47280	0,02364	0,00055 9	0,43000	0,47000	0,47000	0,50000	0,50000
Mn	0,73871	0,09655	0,00932	0,60000	0,75000	0,75000	0,75000	0,90000
P	0,02591 4	0,007659	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,03903 2	0,009631	0,00009 3	0,02000 0	0,04000 0	0,04000 0	0,04000 0	0,05000 0
Si	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	46,086	8,536	72,858	26,300	39,300	46,100	52,400	69,900
C_p (J/kg·K)	578,77	111,63	12462,1 4	466,00	511,00	536,00	601,00	868,00
ρ (kg/m ³)	7876,6	21,0	439,7	7822,0	7861,0	7878,0	7893,0	7923,0
α (m ² /s)	1,0609	0,3088	0,0954	0,4200	0,8300	1,1100	1,2900	1,7600

1078

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,79731	0,04420	0,00195	0,72000	0,79000	0,79000	0,85000	0,85000
Mn	0,43871	0,09655	0,00932	0,30000	0,45000	0,45000	0,45000	0,60000
P	0,02591 4	0,007659	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,03903 2	0,009631	0,00009 3	0,02000 0	0,04000 0	0,04000 0	0,04000 0	0,05000 0
Si	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	41,217	8,270	68,397	21,100	35,600	41,800	47,300	61,200
C_p (J/kg·K)	603,99	140,13	19636,9 5	470,00	525,00	550,00	615,00	968,00
ρ (kg/m ³)	7875,4	18,5	340,7	7828,0	7861,0	7876,0	7889,0	7920,0
α (m ² /s)	0,9251	0,2909	0,0846	0,3000	0,7400	0,9800	1,1400	1,5200

1095

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,97731	0,04420	0,00195	0,90000	0,97000	0,97000	1,03000	1,03000
Mn	0,39247	0,06437	0,00414	0,30000	0,40000	0,40000	0,40000	0,50000
P	0,02591 4	0,007659	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,03903 2	0,009631	0,00009 3	0,02000 0	0,04000 0	0,04000 0	0,04000 0	0,05000 0

Si	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	42,452	6,569	43,147	25,100	37,800	43,000	46,900	59,000
Cp(J/kg·K)	559,41	79,90	6384,65	442,00	508,00	533,00	612,00	747,00
ρ (kg/m ³)	7855,3	18,4	338,7	7808,0	7841,0	7856,0	7869,0	7900,0
α (m ² /s)	0,99538	0,23955	0,05738	0,46000	0,81000	1,04000	1,18000	1,54000

Acero al carbono resulfurizado

1145

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,46312	0,02380	0,00056 6	0,42000	0,46000	0,46000	0,49000	0,49000
Mn	0,83710	0,09760	0,00953	0,70000	0,70000	0,85000	0,85000	1,00000
P	0,02688 2	0,009279	0,00008 6	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04500 0
S	0,05914 0	0,009697	0,00009 4	0,04000 0	0,06000 0	0,06000 0	0,07000 0	0,07000 0
Si	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0

λ (W/m·K)	44,624	7,252	52,595	26,000	39,500	45,000	49,600	63,800
C_p (J/kg·K)	553,69	100,47	10093,56	442,00	490,00	512,00	590,00	808,00
ρ (kg/m ³)	7697,9	16,3	266,7	7661,0	7685,0	7697,0	7710,0	7740,0
α (m ² /s)	1,0920	0,2882	0,0831	0,4500	0,8900	1,1400	1,3100	1,7000

Acero al manganeso
1345

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,41129	0,01681	0,000283	0,38000	0,41000	0,41000	0,43000	0,43000
Mn	1,7387	0,0966	0,00932	1,6000	1,7500	1,7500	1,7500	1,9000
P	0,025914	0,007659	0,000059	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030753	0,006437	0,000041	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000
Si	0,25753	0,06437	0,00414	0,15000	0,25000	0,25000	0,25000	0,35000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Mo	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	47,489	7,496	56,188	27,900	42,200	48,000	52,700	66,300
C_p (J/kg·K)	591,87	104,41	10902,46	474,00	524,00	550,00	630,00	855,00
ρ (kg/m ³)	7798,4	17,1	293,0	7758,0	7785,0	7798,0	7811,0	7843,0
α (m ² /s)	1,0701	0,2724	0,0742	0,4500	0,8800	1,1300	1,2800	1,6200

Acero al carbono sin aleación
1524

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
----------	-------	----------	----------	--------	----	---------	----	--------

C	0,22419	0,02093	0,000438	0,19000	0,22000	0,22000	0,25000	0,25000
Mn	1,4903	0,0980	0,00960	1,3500	1,5000	1,5000	1,5000	1,6500
P	0,026129	0,007770	0,000060	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,038817	0,009828	0,000097	0,020000	0,040000	0,040000	0,040000	0,050000
Si	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Mo	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	45,649	7,537	56,812	26,600	40,200	46,000	50,800	66,000
C_p (J/kg·K)	573,08	104,03	10821,34	457,00	507,00	531,00	611,00	834,00
ρ (kg/m ³)	7707,9	16,4	267,3	7671,0	7695,0	7707,0	7720,0	7750,0
α (m ² /s)	1,0787	0,2895	0,0838	0,4500	0,8700	1,1200	1,3000	1,7300

Aceros al níquel

2330

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,31097	0,01712	0,000293	0,28000	0,31000	0,31000	0,33000	0,33000
Mn	0,69355	0,06531	0,00427	0,60000	0,70000	0,70000	0,70000	0,80000
P	0,026129	0,007770	0,000060	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030645	0,006531	0,000043	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000
Si	0,28269	0,04877	0,00238	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000

Ni	3,4677	0,1730	0,0299	3,2500	3,2500	3,5000	3,5000	3,7500
Cr	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	28,608	4,123	16,998	17,300	25,600	29,000	31,300	39,600
Cp(J/kg·K)	522,02	59,25	3510,33	429,00	477,00	499,00	584,00	642,00
ρ (kg/m ³)	8012,3	19,8	391,1	7966,0	7996,0	8012,0	8027,0	8061,0
α (m ² /s)	0,69679	0,14175	0,02009	0,37000	0,57000	0,73000	0,80000	1,00000

2515

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,15129	0,01681	0,00028 3	0,12000	0,15000	0,15000	0,17000	0,17000
Mn	0,49247	0,06437	0,00414	0,40000	0,50000	0,50000	0,50000	0,60000
P	0,02591 4	0,007659	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,03075 3	0,006437	0,00004 1	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0
Si	0,28355	0,04800	0,00230	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	4,9651	0,1705	0,0291	4,7500	4,7500	5,0000	5,0000	5,2500
Cr	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	31,633	4,549	20,695	19,100	28,300	32,100	34,600	43,900
Cp(J/kg·K)	528,80	56,57	3200,55	439,00	485,00	507,00	588,00	644,00
ρ (kg/m ³)	8147,7	21,8	474,1	8094,0	8131,0	8148,0	8164,0	8199,0

$\alpha(m^2/s)$	0,74651	0,14810	0,02193	0,40000	0,62000	0,78000	0,86000	1,06000
-----------------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------

Aceros al cromo-níquel/Austenítico

301

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,13172	0,01703	0,000290	0,10000	0,13000	0,13000	0,15000	0,15000
Mn	1,8903	0,0657	0,00432	1,8000	1,8000	1,9000	1,9000	2,0000
P	0,026989	0,009257	0,000086	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,045000
S	0,021828	0,005281	0,000028	0,015000	0,020000	0,020000	0,030000	0,030000
Si	0,63989	0,08180	0,00669	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000	0,75000
Ni	6,8387	0,6929	0,4801	6,0000	6,0000	7,0000	7,0000	8,0000
Cr	17,194	0,708	0,501	16,000	17,000	17,000	18,000	18,000
Mo	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	18,578	2,556	6,534	12,900	16,900	18,300	20,100	27,400
C_p (J/kg·K)	564,42	75,50	5700,36	470,00	510,00	533,00	612,00	748,00
ρ (kg/m ³)	7885,6	19,5	379,6	7838,0	7870,0	7887,0	7900,0	7933,0
$\alpha(m^2/s)$	0,41948	0,04398	0,00193	0,30000	0,39000	0,42000	0,45000	0,54000

302

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,13172	0,01703	0,000290	0,10000	0,13000	0,13000	0,15000	0,15000
Mn	1,8903	0,0657	0,00432	1,8000	1,8000	1,9000	1,9000	2,0000
P	0,026989	0,009257	0,000086	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,045000
S	0,021828	0,005281	0,000028	0,015000	0,020000	0,020000	0,030000	0,030000

	8		8	0	0	0	0	0
Si	0,63989	0,08180	0,00669	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000	0,75000
Ni	6,8387	0,6929	0,4801	6,0000	6,0000	7,0000	7,0000	8,0000
Cr	18,194	0,708	0,501	17,000	18,000	18,000	19,000	19,000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	17,967	2,685	7,210	11,600	16,100	17,800	19,700	27,000
Cp(J/kg·K)	552,69	73,85	5453,51	460,00	499,00	521,00	598,00	733,00
ρ (kg/m ³)	8023,3	19,6	384,7	7976,0	8008,0	8022,0	8038,0	8071,0
α (m ² /s)	0,40644	0,04069	0,00166	0,30000	0,38000	0,41000	0,43000	0,52000

304

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,06989 2	0,010114	0,00010 2	0,05000 0	0,07000 0	0,07000 0	0,08000 0	0,08000 0
Mn	1,8914	0,0651	0,00423	1,8000	1,8000	1,9000	1,9000	2,0000
P	0,02688 2	0,009279	0,00008 6	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04500 0
S	0,02172 0	0,005214	0,00002 7	0,01500 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0
Si	0,63860	0,08099	0,00656	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000	0,75000
Ni	9,0618	0,8594	0,7386	8,0000	8,0000	9,2500	9,2500	10,5000
Cr	19,183	0,703	0,494	18,000	19,000	19,000	20,000	20,000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	17,364	2,593	6,726	11,200	15,500	17,200	19,000	26,100
Cp(J/kg·K)	545,88	72,23	5216,52	456,00	493,00	516,00	590,00	720,00
ρ (kg/m ³)	7918,0	19,4	374,8	7872,0	7903,0	7917,0	7933,0	7965,0

$\alpha(m^2/s)$	0,40255	0,04062	0,00165	0,30000	0,38000	0,40000	0,43000	0,52000
-----------------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------	---------

310

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,23097	0,01712	0,000293	0,20000	0,23000	0,23000	0,25000	0,25000
Mn	1,8935	0,0653	0,00427	1,8000	1,9000	1,9000	1,9000	2,0000
P	0,027043	0,009461	0,000090	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,045000
S	0,021559	0,005188	0,000027	0,015000	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000
Si	1,3129	0,1306	0,0171	1,1000	1,3000	1,3000	1,3000	1,5000
Ni	20,306	1,038	1,077	19,000	19,000	20,500	20,500	22,000
Cr	24,671	0,548	0,300	24,000	24,400	24,400	25,400	25,400
Mo	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
$\lambda(W/m\cdot K)$	16,774	2,506	6,278	10,800	15,000	16,600	18,400	25,300
$C_p(J/kg\cdot K)$	540,22	71,54	5118,07	451,00	489,00	511,00	584,00	714,00
$\rho(kg/m^3)$	7969,5	19,8	391,2	7924,0	7954,0	7969,0	7984,0	8018,0
$\alpha(m^2/s)$	0,39025	0,03925	0,00154	0,29000	0,36000	0,39000	0,42000	0,50000

316

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,070215	0,009951	0,000099	0,050000	0,070000	0,070000	0,080000	0,080000
Mn	1,8892	0,0647	0,00419	1,8000	1,8000	1,9000	1,9000	2,0000
P	0,026720	0,009091	0,000083	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,045000
S	0,021882	0,005236	0,000027	0,015000	0,020000	0,020000	0,030000	0,030000

Si	0,64129	0,08049	0,00648	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000	0,75000
Ni	11,656	1,365	1,863	10,000	10,000	12,000	12,000	14,000
Cr	17,204	0,697	0,486	16,000	17,000	17,000	18,000	18,000
Mo	2,5753	0,3358	0,1128	2,0000	2,5000	2,5000	3,0000	3,0000
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	15,713	2,351	5,525	10,100	14,000	15,600	17,300	23,600
C_p (J/kg·K)	528,79	70,01	4901,60	441,00	478,00	500,00	572,00	699,00
ρ (kg/m ³)	8109,9	20,1	404,5	8063,0	8094,0	8109,0	8125,0	8159,0
α (m ² /s)	0,36737	0,03741	0,00140	0,27000	0,34000	0,37000	0,39000	0,47000

347

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,07021 5	0,009951	0,00009 9	0,05000 0	0,07000 0	0,07000 0	0,08000 0	0,08000 0
Mn	1,8892	0,0647	0,00419	1,8000	1,8000	1,9000	1,9000	2,0000
P	0,02672 0	0,009091	0,00008 3	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04500 0
S	0,02188 2	0,005236	0,00002 7	0,01500 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0
Si	0,64129	0,08049	0,00648	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000	0,75000
Ni	10,656	1,365	1,863	9,000	9,000	11,000	11,000	13,000
Cr	18,204	0,697	0,486	17,000	18,000	18,000	19,000	19,000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	16,655	2,488	6,190	10,700	14,900	16,500	18,200	25,000
C_p (J/kg·K)	547,79	70,26	4935,80	460,00	497,00	518,00	588,00	722,00
ρ (kg/m ³)	7997,6	19,8	393,4	7952,0	7982,0	7997,0	8012,0	8046,0
α (m ² /s)	0,38049	0,03796	0,00144	0,28000	0,36000	0,38000	0,40000	0,48000

Aceros al molibdeno

4028

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,28129	0,01681	0,000283	0,25000	0,28000	0,28000	0,30000	0,30000
Mn	0,79247	0,06437	0,00414	0,70000	0,80000	0,80000	0,80000	0,90000
P	0,025914	0,007659	0,000059	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,041613	0,005145	0,000026	0,035000	0,040000	0,040000	0,040000	0,050000
Si	0,28355	0,04800	0,00230	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Mo	0,25591	0,03351	0,00112	0,20000	0,25000	0,25000	0,30000	0,30000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	41,878	6,817	46,471	25,200	36,600	42,100	46,600	60,500
C_p (J/kg·K)	558,25	79,75	6359,45	441,00	507,00	532,00	611,00	746,00
ρ (kg/m ³)	7876,4	18,5	340,7	7829,0	7862,0	7877,0	7890,0	7921,0
α (m ² /s)	0,98260	0,24728	0,06115	0,46000	0,76000	1,02000	1,18000	1,54000

Aceros al cromo/Ferrítico

405

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,061398	0,017340	0,000301	0,030000	0,060000	0,060000	0,080000	0,080000
Mn	0,83710	0,10005	0,01001	0,70000	0,70000	0,85000	0,85000	1,00000
P	0,026344	0,007736	0,000060	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,02817	0,003868	0,00001	0,02000	0,03000	0,03000	0,03000	0,03000

	2		5	0	0	0	0	0
Si	0,77151	0,16675	0,02781	0,50000	0,75000	0,75000	1,00000	1,00000
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	13,274	1,077	1,160	11,500	13,000	13,000	14,500	14,500
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	34,014	5,083	25,839	21,900	30,300	33,700	37,200	51,000
C_p (J/kg·K)	527,39	67,68	4580,59	443,00	479,00	500,00	566,00	693,00
ρ (kg/m ³)	7739,0	19,2	367,9	7695,0	7723,0	7739,0	7753,0	7786,0
α (m ² /s)	0,83467	0,08290	0,00687	0,61000	0,78000	0,83000	0,89000	1,07000

410

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,13108	0,01670	0,00027 9	0,10000	0,13000	0,13000	0,15000	0,15000
Mn	0,84032	0,09547	0,00911	0,70000	0,85000	0,85000	0,85000	1,00000
P	0,02580 6	0,007671	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,02150 5	0,005073	0,00002 6	0,01500 0	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0
Si	0,76613	0,15911	0,02532	0,50000	0,75000	0,75000	0,75000	1,00000
Ni	0,61151	0,08506	0,00723	0,50000	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000
Cr	12,661	0,693	0,480	11,500	12,500	12,500	13,500	13,500
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	27,221	4,064	16,517	17,500	24,300	27,000	29,800	40,900
C_p (J/kg·K)	524,91	67,29	4527,45	441,00	477,00	496,00	563,00	690,00

ρ (kg/m ³)	7794,1	19,3	374,1	7749,0	7778,0	7794,0	7809,0	7842,0
α (m ² /s)	0,66664	0,06609	0,00437	0,49000	0,63000	0,67000	0,71000	0,85000

420

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,13097	0,01712	0,00029 3	0,10000	0,13000	0,13000	0,15000	0,15000
Mn	0,86978	0,08196	0,00672	0,75000	0,88000	0,88000	0,88000	1,00000
P	0,02612 9	0,007770	0,00006 0	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,02155 9	0,005188	0,00002 7	0,01500 0	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0
Si	0,85968	0,09797	0,00960	0,70000	0,85000	0,85000	0,85000	1,00000
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	13,161	0,708	0,502	12,000	13,000	13,000	14,000	14,000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	27,332	4,088	16,712	17,600	24,400	27,100	30,000	41,100
C_p (J/kg·K)	524,91	67,29	4527,45	441,00	477,00	496,00	563,00	690,00
ρ (kg/m ³)	7744,0	19,2	368,2	7700,0	7728,0	7744,0	7758,0	7791,0
α (m ² /s)	0,67321	0,06694	0,00448	0,50000	0,63000	0,67000	0,71000	0,86000

430

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,10280	0,01395	0,00019 5	0,08000	0,10000	0,10000	0,12000	0,12000
Mn	0,86978	0,08196	0,00672	0,75000	0,88000	0,88000	0,88000	1,00000
P	0,02612 9	0,007770	0,00006 0	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0

S	0,03064 5	0,006531	0,00004 3	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0
Si	0,85968	0,09797	0,00960	0,70000	0,85000	0,85000	0,85000	1,00000
Ni	0,61140	0,08699	0,00757	0,50000	0,50000	0,63000	0,63000	0,75000
Cr	17,161	0,708	0,502	16,000	17,000	17,000	18,000	18,000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	26,163	3,905	15,251	16,900	23,400	25,900	28,700	39,300
C_p (J/kg·K)	513,63	65,84	4335,29	432,00	467,00	486,00	551,00	676,00
ρ (kg/m ³)	7749,0	19,2	368,7	7705,0	7733,0	7749,0	7763,0	7796,0
α (m ² /s)	0,65853	0,06550	0,00429	0,49000	0,62000	0,66000	0,70000	0,84000

Aceros al cromo-molibdeno

4130

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,31129	0,01681	0,00028 3	0,28000	0,31000	0,31000	0,33000	0,33000
Mn	0,49247	0,06437	0,00414	0,40000	0,50000	0,50000	0,50000	0,60000
P	0,02591 4	0,007659	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,03075 3	0,006437	0,00004 1	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0
Si	0,28355	0,04800	0,00230	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,97581	0,10471	0,01096	0,80000	0,95000	0,95000	1,10000	1,10000
Mo	0,20591	0,03351	0,00112	0,15000	0,20000	0,20000	0,25000	0,25000
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	38,028	5,880	34,576	22,600	33,800	38,600	42,000	52,900
C_p (J/kg·K)	572,92	102,68	10544,1	457,00	508,00	531,00	610,00	831,00

)			9					
ρ (kg/m ³)	7890,5	18,5	341,7	7843,0	7876,0	7891,0	7904,0	7935,0
α (m ² /s)	0,87516	0,22104	0,04886	0,37000	0,72000	0,92000	1,04000	1,32000

4140

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,41140	0,01684	0,000283	0,38000	0,41000	0,41000	0,43000	0,43000
Mn	0,86780	0,08102	0,00656	0,75000	0,81500	0,88000	0,88000	1,00000
P	0,025968	0,007635	0,000058	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030806	0,006451	0,000042	0,020000	0,030000	0,030000	0,035000	0,040000
Si	0,28392	0,04811	0,00231	0,20000	0,28000	0,28000	0,31500	0,35000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,97742	0,10545	0,01112	0,80000	0,95000	0,95000	1,10000	1,10000
Mo	0,20618	0,03356	0,00113	0,15000	0,20000	0,20000	0,25000	0,25000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	38,770	6,004	36,045	23,000	34,500	39,300	42,900	53,900
C_p (J/kg·K)	528,50	94,75	8977,42	422,00	468,00	490,00	563,00	767,00
ρ (kg/m ³)	7883,4	18,5	341,3	7836,0	7869,0	7884,0	7897,0	7928,0
α (m ² /s)	0,96822	0,24499	0,06002	0,41000	0,80000	1,02000	1,16000	1,46000

Aceros al níquel-cromo-molibdeno

4320

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,20172	0,01703	0,000290	0,17000	0,20000	0,20000	0,22000	0,22000
Mn	0,54032	0,06574	0,00432	0,45000	0,45000	0,55000	0,55000	0,65000
P	0,02526	0,006155	0,00003	0,02000	0,02000	0,02000	0,03000	0,03500

	9		8	0	0	0	0	0
S	0,03096 8	0,006574	0,00004 3	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0	0,04000 0
Si	0,23505	0,04895	0,00240	0,15000	0,23000	0,23000	0,30000	0,30000
Ni	1,7992	0,1219	0,0148	1,6500	1,6500	1,8300	1,8300	2,0000
Cr	0,51935	0,07078	0,00501	0,40000	0,50000	0,50000	0,60000	0,60000
Mo	0,25699	0,03410	0,00116	0,20000	0,25000	0,25000	0,30000	0,30000
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	34,410	5,329	28,400	20,400	30,600	34,800	38,100	47,900
C_p (J/kg·K)	554,05	99,46	9893,11	442,00	491,00	515,00	590,00	804,00
ρ (kg/m ³)	7785,1	18,2	331,9	7738,0	7771,0	7785,0	7799,0	7829,0
α (m ² /s)	0,83023	0,21003	0,04411	0,35000	0,68000	0,87000	0,99000	1,26000

8115

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,16129	0,01681	0,00028 3	0,13000	0,16000	0,16000	0,18000	0,18000
Mn	0,79247	0,06437	0,00414	0,70000	0,80000	0,80000	0,80000	0,90000
P	0,02505 4	0,006161	0,00003 8	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,03500 0
S	0,03075 3	0,006437	0,00004 1	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0
Si	0,23355	0,04800	0,00230	0,15000	0,23000	0,23000	0,23000	0,30000
Ni	0,28602	0,06819	0,00465	0,20000	0,20000	0,30000	0,30000	0,40000
Cr	0,41720	0,06981	0,00487	0,30000	0,40000	0,40000	0,50000	0,50000
Mo	0,12075	0,02500	0,00062 5	0,08000	0,12000	0,12000	0,15000	0,15000
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	35,025	6,709	45,005	18,800	30,000	35,500	39,800	52,200
C_p (J/kg·K)	535,15	74,17	5500,73	442,00	481,00	504,00	582,00	714,00

ρ (kg/m ³)	7827,5	22,7	514,8	7771,0	7812,0	7826,0	7845,0	7879,0
α (m ² /s)	0,86467	0,23922	0,05722	0,37000	0,66000	0,90000	1,05000	1,39000

8617

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,18075	0,01700	0,000289	0,15000	0,18000	0,18000	0,20000	0,20000
Mn	0,79462	0,06458	0,00417	0,70000	0,80000	0,80000	0,80000	0,90000
P	0,026022	0,007785	0,000061	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030538	0,006458	0,000042	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000
Si	0,28194	0,04826	0,00233	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	0,53226	0,10290	0,01059	0,40000	0,40000	0,55000	0,55000	0,70000
Cr	0,51505	0,07030	0,00494	0,40000	0,50000	0,50000	0,60000	0,60000
Mo	0,20376	0,03460	0,00120	0,15000	0,20000	0,20000	0,25000	0,25000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	37,946	7,187	51,650	20,500	32,600	38,500	43,100	56,100
Cp(J/kg·K)	556,69	76,31	5823,43	460,00	502,00	526,00	604,00	740,00
ρ (kg/m ³)	7821,1	22,5	508,1	7765,0	7806,0	7819,0	7838,0	7873,0
α (m ² /s)	0,90057	0,24582	0,06043	0,39000	0,69000	0,94000	1,09000	1,44000

8650

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,51129	0,01681	0,000283	0,48000	0,51000	0,51000	0,53000	0,53000
Mn	0,86849	0,08084	0,00653	0,75000	0,88000	0,88000	0,88000	1,00000
P	0,025914	0,007659	0,000059	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030753	0,006437	0,000041	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000

Si	0,28355	0,04800	0,00230	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	0,52903	0,10229	0,01046	0,40000	0,40000	0,55000	0,55000	0,70000
Cr	0,51720	0,06981	0,00487	0,40000	0,50000	0,50000	0,60000	0,60000
Mo	0,20484	0,03447	0,00119	0,15000	0,20000	0,20000	0,25000	0,25000
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	29,768	5,645	31,869	16,100	25,500	30,300	33,800	44,000
C_p (J/kg·K)	547,10	74,89	5608,37	453,00	493,00	516,00	592,00	728,00
ρ (kg/m ³)	7844,1	22,6	512,7	7787,0	7829,0	7842,0	7862,0	7896,0
α (m ² /s)	0,71654	0,19551	0,03822	0,31000	0,55000	0,75000	0,87000	1,15000

8822

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,23129	0,01681	0,00028 3	0,20000	0,23000	0,23000	0,25000	0,25000
Mn	0,86849	0,08084	0,00653	0,75000	0,88000	0,88000	0,88000	1,00000
P	0,02722 0	0,006322	0,00004 0	0,01200 0	0,02500 0	0,02500 0	0,02500 0	0,04000 0
S	0,03075 3	0,006437	0,00004 1	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0
Si	0,25753	0,06437	0,00414	0,15000	0,25000	0,25000	0,25000	0,35000
Ni	0,52903	0,10229	0,01046	0,40000	0,40000	0,55000	0,55000	0,70000
Cr	0,51720	0,06981	0,00487	0,40000	0,50000	0,50000	0,60000	0,60000
Mo	0,35430	0,03569	0,00127	0,30000	0,35000	0,35000	0,40000	0,40000
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	33,309	6,285	39,502	18,000	28,600	33,800	37,800	49,200
C_p (J/kg·K)	573,78	78,54	6168,90	475,00	517,00	541,00	623,00	763,00
ρ (kg/m ³)	7937,8	19,6	384,9	7890,0	7923,0	7939,0	7953,0	7985,0
α (m ² /s)	0,75573	0,20623	0,04253	0,32000	0,58000	0,79000	0,92000	1,21000

Aceros al níquel-molibdeno

4626

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,27097	0,01712	0,000293	0,24000	0,27000	0,27000	0,29000	0,29000
Mn	0,54355	0,06531	0,00427	0,45000	0,55000	0,55000	0,55000	0,65000
P	0,025215	0,006223	0,000039	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,035000
S	0,030645	0,006531	0,000043	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000
Si	0,23269	0,04877	0,00238	0,15000	0,23000	0,23000	0,23000	0,30000
Ni	0,83065	0,10378	0,01077	0,70000	0,70000	0,85000	0,85000	1,00000
Cr	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Mo	0,20538	0,03400	0,00116	0,15000	0,20000	0,20000	0,25000	0,25000
V	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
λ (W/m·K)	39,289	7,513	56,443	21,200	33,600	39,800	44,700	58,600
C_p (J/kg·K)	402,10	56,07	3143,81	332,00	361,00	379,00	437,00	538,00
ρ (kg/m ³)	7810,0	20,9	438,1	7759,0	7794,0	7810,0	7826,0	7859,0
α (m ² /s)	1,2947	0,3592	0,1290	0,5500	0,9900	1,3500	1,5800	2,0900

Aceros al cromo

5132

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,33075	0,01700	0,000289	0,30000	0,33000	0,33000	0,35000	0,35000
Mn	0,69462	0,06458	0,00417	0,60000	0,70000	0,70000	0,70000	0,80000
P	0,026022	0,007785	0,000061	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030538	0,006458	0,000042	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000
Si	0,28194	0,04826	0,00233	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000

Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,89624	0,08739	0,00764	0,75000	0,88000	0,88000	1,00000	1,00000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	41,418	7,937	62,991	22,300	35,500	41,900	47,100	61,800
Cp(J/kg·K)	561,03	55,35	3063,56	474,00	519,00	541,00	620,00	677,00
ρ (kg/m ³)	7882,7	23,0	530,4	7826,0	7866,0	7881,0	7900,0	7935,0
α (m ² /s)	0,95696	0,24530	0,06017	0,45000	0,73000	0,99000	1,15000	1,53000

5140

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,41129	0,01681	0,00028 3	0,38000	0,41000	0,41000	0,43000	0,43000
Mn	0,79247	0,06437	0,00414	0,70000	0,80000	0,80000	0,80000	0,90000
P	0,02591 4	0,007659	0,00005 9	0,02000 0	0,02000 0	0,02000 0	0,03000 0	0,04000 0
S	0,03075 3	0,006437	0,00004 1	0,02000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,03000 0	0,04000 0
Si	0,28355	0,04800	0,00230	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
Cr	0,81720	0,06981	0,00487	0,70000	0,80000	0,80000	0,90000	0,90000
Mo	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
V	0,00000 0	0,000000	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0	0,00000 0
λ (W/m·K)	40,658	6,108	37,306	24,600	36,300	41,100	45,000	56,800
Cp(J/kg·K)	520,98	65,86	4338,13	433,00	472,00	495,00	568,00	675,00
ρ (kg/m ³)	7858,2	21,1	446,2	7807,0	7842,0	7859,0	7875,0	7909,0

$\alpha(m^2/s)$	1,0153	0,2184	0,0477	0,5000	0,8500	1,0600	1,1800	1,4500
-----------------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------	--------

Aceros al cromo-vanadio

6150

Variable	Media	Desv.Est	Varianza	Mínimo	Q1	Mediana	Q3	Máximo
C	0,51129	0,01681	0,000283	0,48000	0,51000	0,51000	0,53000	0,53000
Mn	0,79247	0,06437	0,00414	0,70000	0,80000	0,80000	0,80000	0,90000
P	0,025914	0,007659	0,000059	0,020000	0,020000	0,020000	0,030000	0,040000
S	0,030753	0,006437	0,000041	0,020000	0,030000	0,030000	0,030000	0,040000
Si	0,28355	0,04800	0,00230	0,20000	0,28000	0,28000	0,28000	0,35000
Ni	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
Cr	0,97581	0,10471	0,01096	0,80000	0,95000	0,95000	1,10000	1,10000
Mo	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000	0,000000
V	0,12516	0,01777	0,000316	0,10000	0,10000	0,13000	0,13000	0,15000
λ (W/m·K)	36,308	6,959	48,424	19,600	31,100	36,800	41,300	54,100
C_p (J/kg·K)	546,31	76,14	5797,81	451,00	491,00	514,00	594,00	729,00
ρ (kg/m ³)	7747,8	20,8	431,3	7697,0	7732,0	7748,0	7763,0	7797,0
$\alpha(m^2/s)$	0,88754	0,24654	0,06078	0,38000	0,68000	0,93000	1,08000	1,43000

Anexo 3. Alcance del modelo

AISI-SAE		C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	V
1008	min	0,06	0,25	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	0,1	0,5	0,04	0,05	0	0	0	0	0
1030	min	0,28	0,6	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	0,34	0,9	0,04	0,05	0	0	0	0	0
1045	min	0,43	0,6	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	0,5	0,9	0,04	0,05	0	0	0	0	0
1078	min	0,72	0,3	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	0,85	0,6	0,04	0,05	0	0	0	0	0
1095	min	0,9	0,3	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	1,03	0,5	0,04	0,05	0	0	0	0	0
1145	min	0,42	0,7	0,02	0,04	0	0	0	0	0
	max	0,49	1	0,045	0,07	0	0	0	0	0
1345	min	0,38	1,6	0,02	0,02	0,15	0	0	0	0
	max	0,43	1,9	0,04	0,04	0,35	0	0	0	0
1524	min	0,19	1,35	0,02	0,02	0	0	0	0	0
	max	0,25	1,65	0,04	0,05	0	0	0	0	0
2330	min	0,28	0,6	0,02	0,02	0,2	3,25	0	0	0
	max	0,33	0,8	0,04	0,04	0,35	3,75	0	0	0
2515	min	0,12	0,4	0,02	0,02	0,2	4,75	0	0	0
	max	0,17	0,6	0,04	0,04	0,35	5,25	0	0	0
301	min	0,1	1,8	0,02	0,015	0,5	6	16	0	0
	max	0,15	2	0,045	0,03	0,75	8	18	0	0
302	min	0,1	1,8	0,02	0,015	0,5	6	17	0	0
	max	0,15	2	0,045	0,03	0,75	8	19	0	0
304	min	0,05	1,8	0,02	0,015	0,5	8	18	0	0
	max	0,08	2	0,045	0,03	0,75	10,5	20	0	0
310	min	0,2	1,8	0,02	0,015	1,1	19	24	0	0
	max	0,25	2	0,045	0,03	1,5	22	26	0	0
316	min	0,05	1,8	0,02	0,015	0,5	10	16	2	0
	max	0,08	2	0,045	0,03	0,75	14	18	3	0
347	min	0,05	1,8	0,02	0,015	0,5	9	17	0	0
	max	0,08	2	0,045	0,03	0,75	13	19	0	0
4028	min	0,25	0,7	0,02	0,035	0,2	0	0	0,2	0
	max	0,3	0,9	0,04	0,05	0,35	0	0	0,3	0

	min	0,03	0,7	0,02	0,02	0,5	0	11,5	0	0
--	-----	------	-----	------	------	-----	---	------	---	---

		Composición Química (w%)								
⁴⁰⁵ AISI		C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	V
1008		0,083	0,368	0,026	0,039	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
	max	0,08	1	0,04	0,03	1	0	14,5	0	0
410	min	0,1	0,7	0,02	0,015	0,5	0,5	11,5	0	0
	max	0,15	1	0,04	0,03	1	0,75	13,5	0	0
4130	min	0,28	0,4	0,02	0,02	0,2	0	0,8	0,15	0
	max	0,33	0,6	0,04	0,04	0,35	0	1,1	0,25	0
4140	min	0,38	0,75	0,02	0,02	0,2	0	0,8	0,15	0
	max	0,43	1	0,04	0,04	0,35	0	1,1	0,25	0
420	min	0,1	0,75	0,02	0,015	0,7	0	12	0	0
	max	0,15	1	0,04	0,03	1	0	14	0	0
430	min	0,08	0,75	0,02	0,02	0,7	0,5	16	0	0
	max	0,12	1	0,04	0,04	1	0,75	18	0	0
4320	min	0,17	0,45	0,02	0,02	0,15	1,65	0,4	0,2	0
	max	0,22	0,65	0,035	0,04	0,3	2	0,6	0,3	0
4626	min	0,24	0,45	0,02	0,02	0,15	0,7	0	0,15	0
	max	0,29	0,65	0,035	0,04	0,3	1	0	0,25	0
5132	min	0,3	0,6	0,02	0,02	0,2	0	0,75	0	0
	max	0,35	0,8	0,04	0,04	0,35	0	1	0	0
5140	min	0,38	0,7	0,02	0,02	0,2	0	0,7	0	0
	max	0,43	0,9	0,04	0,04	0,35	0	0,9	0	0
6150	min	0,48	0,7	0,02	0,02	0,2	0	0,8	0	0,1
	max	0,53	0,9	0,04	0,04	0,35	0	1,1	0	0,15
8115	min	0,13	0,7	0,02	0,02	0,15	0,2	0,3	0,08	0
	max	0,18	0,9	0,035	0,04	0,3	0,4	0,5	0,15	0
8617	min	0,15	0,7	0,02	0,02	0,2	0,4	0,4	0,15	0
	max	0,2	0,9	0,04	0,04	0,35	0,7	0,6	0,25	0
8650	min	0,48	0,75	0,02	0,02	0,2	0,4	0,4	0,15	0
	max	0,53	1	0,04	0,04	0,35	0,7	0,6	0,25	0
8822	min	0,2	0,75	0,04	0,02	0,15	0,4	0,4	0,3	0
	max	0,25	1	0,2	0,04	0,35	0,7	0,6	0,4	0

Anexo 4. Composición química media

1030	0,316	0,741	0,026	0,040	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1045	0,476	0,745	0,026	0,040	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1078	0,803	0,445	0,026	0,040	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1095	0,986	0,396	0,026	0,040	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1145	0,474	0,840	0,027	0,060	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
1345	0,417	1,746	0,026	0,032	0,258	0,000	0,000	0,000	0,000
1524	0,229	1,508	0,026	0,039	0,004	0,000	0,000	0,000	0,000
2330	0,314	0,708	0,026	0,031	0,283	3,468	0,000	0,000	0,000
2515	0,155	0,499	0,026	0,031	0,287	5,000	0,000	0,000	0,000
301	0,134	1,895	0,027	0,022	0,644	6,890	17,194	0,000	0,000
302	0,133	1,910	0,027	0,022	0,648	6,903	18,387	0,000	0,000
304	0,072	1,911	0,027	0,022	0,647	9,126	19,387	0,000	0,000
310	0,232	1,913	0,027	0,022	1,321	20,392	24,886	0,000	0,000
316	0,073	1,909	0,027	0,022	0,657	11,860	17,477	2,575	0,000
347	0,071	1,909	0,027	0,022	0,649	10,763	18,398	0,032	0,000
4028	0,282	0,812	0,026	0,042	0,292	0,097	0,204	0,256	0,000
405	0,065	0,845	0,027	0,029	0,775	0,000	13,274	0,003	0,000
410	0,132	0,848	0,026	0,022	0,777	0,612	12,817	0,000	0,000
4130	0,313	0,500	0,026	0,031	0,294	0,005	1,121	0,206	0,000
4140	0,415	0,872	0,026	0,031	0,288	0,000	0,989	0,209	0,000
420	0,136	0,878	0,026	0,022	0,863	0,000	13,173	0,003	0,000
430	0,104	0,878	0,026	0,031	0,870	0,611	17,312	0,000	0,000
4320	0,203	0,548	0,026	0,031	0,246	1,805	0,713	0,257	0,000
4626	0,273	0,548	0,026	0,031	0,236	0,848	0,006	0,209	0,000
5132	0,334	0,699	0,026	0,031	0,285	0,008	0,896	0,003	0,000
5140	0,415	0,799	0,026	0,031	0,287	0,000	0,828	0,000	0,000
6150	0,516	0,800	0,026	0,031	0,287	0,000	0,985	0,000	0,125
8115	0,167	0,800	0,025	0,031	0,237	0,286	0,429	0,121	0,001
8617	0,183	0,802	0,026	0,031	0,285	0,534	0,520	0,205	0,000
8650	0,513	0,876	0,026	0,031	0,287	0,533	0,524	0,208	0,000
8822	0,237	0,877	0,028	0,031	0,261	0,533	0,524	0,357	0,000

Anexo 5. Propiedades termofísicas medias

AISI	Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)							Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)						
	0	100	200	300	400	600	800	0	100	200	300	400	600	800
1008	59,3	58,0	53,0	49,5	45,5	36,5	27,1	481,0	510,4	523,6	536,7	566,9	623,3	726,3
1030	53,6	51,9	49,6	46,7	43,3	36,0	26,4	491,3	517,2	527,4	547,1	577,8	631,8	817,9
1045	52,6	51,4	48,7	46,1	42,2	34,3	25,3	491,4	514,2	524,4	540,3	568,2	613,0	845,2
1078	49,4	48,9	45,7	42,0	38,7	33,0	25,8	495,4	528,2	540,8	554,1	585,4	627,1	942,1
1095	48,4	47,4	44,6	41,5	39,0	33,4	26,0	466,4	511,4	524,7	537,9	568,2	624,5	729,9
1145	51,8	51,1	48,1	42,9	40,1	33,5	26,0	466,1	493,5	504,9	517,1	549,5	602,0	786,2
1345	50,4	48,8	46,8	41,6	37,7	32,4	24,9	499,0	527,5	541,5	554,2	588,9	642,2	832,9
1524	52,4	50,7	48,9	43,9	39,9	34,5	26,7	482,4	510,7	522,7	535,3	568,8	623,1	814,6
2330	47,7	45,4	42,9	40,5	37,9	31,7	26,5	452,3	480,2	492,9	503,1	545,7	596,5	627,9
2515	47,4	44,7	42,0	39,2	36,4	30,3	24,8	462,9	488,6	501,6	510,3	550,0	600,1	628,7
301	17,0	18,4	19,6	21,1	22,2	24,9	27,0	495,1	514,1	522,3	537,2	572,8	622,4	728,1
302	16,3	17,9	19,1	20,6	22,1	24,7	27,0	485,4	503,9	512,0	526,3	561,2	609,9	714,1
304	16,0	17,7	18,9	20,2	21,5	24,1	26,4	480,3	497,9	506,0	521,1	553,3	601,4	704,1
310	14,9	16,5	17,6	18,9	19,8	21,5	22,9	475,3	492,6	500,7	515,7	547,6	595,2	696,9
316	17,1	18,4	19,0	20,0	21,3	22,9	24,3	465,2	482,3	490,4	504,8	536,1	582,6	682,2
347	16,0	17,4	18,3	19,4	20,8	22,9	24,9	485,1	501,4	509,8	522,9	553,8	600,1	702,7
4028	50,2	48,5	45,8	42,1	39,6	34,1	28,6	465,3	510,1	523,2	536,4	566,7	622,9	725,8
405	25,5	28,9	30,7	31,9	32,8	34,8	36,0	467,1	483,2	491,4	504,1	533,8	578,5	677,3
410	25,5	28,9	30,9	32,1	33,2	35,0	36,3	465,1	480,7	488,8	501,3	530,8	575,2	673,5
4130	45,9	43,1	41,8	41,0	37,5	33,5	29,5	482,1	510,6	522,7	535,8	568,7	622,1	809,4
4140	46,4	43,5	42,7	41,4	38,0	33,7	29,7	445,3	471,8	482,9	495,0	525,4	574,9	748,7
420	26,3	29,2	31,0	32,6	33,7	35,4	36,8	464,9	480,6	488,7	501,2	530,7	575,1	674,3
430	21,7	24,7	26,9	29,4	31,0	33,8	36,2	455,1	470,4	478,4	490,7	519,6	562,9	659,3
4320	45,7	44,0	41,8	39,9	37,7	33,9	28,9	466,0	493,7	505,5	518,3	550,1	601,8	783,0
4626	48,6	48,3	47,1	44,7	41,8	34,9	27,9	351,1	365,3	372,5	383,4	411,5	447,7	526,4
5132	49,2	47,1	45,0	42,9	38,9	32,8	27,3	497,8	521,1	531,2	543,2	576,5	629,0	659,8

5140	48,4	45,4	44,0	42,3	38,0	32,1	27,0	457,5	475,6	484,7	499,6	534,5	579,5	659,3
6150	45,7	45,1	43,9	42,7	41,0	33,3	32,7	475,0	494,1	504,2	518,7	556,7	605,5	710,6
8115	44,9	43,1	41,0	39,0	36,9	33,1	29,1	466,2	484,6	494,7	508,7	545,3	593,0	696,2
8617	44,3	42,5	40,5	38,7	36,5	32,9	29,1	485,1	504,9	514,9	529,9	566,2	615,2	722,3
8650	43,5	41,8	39,9	38,1	36,2	32,4	28,8	477,3	496,8	506,3	521,0	556,7	604,8	710,1
8822	43,9	42,1	40,2	38,4	36,4	32,7	28,9	500,2	520,6	530,7	546,0	583,5	633,9	744,3
	<i>Densidad (kg/m³)</i>							<i>Difusividad Térmica ((m²/s)10⁻⁵)</i>						
<i>AISI</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>
1008	7871,9	7884,6	7898,2	7909,5	7922,9	7908,8	7886,5	1,6	1,4	1,3	1,2	1,1	0,8	0,6
1030	7941,8	7954,6	7968,2	7979,6	7993,2	7979,0	7956,5	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	0,8	0,5
1045	7928,6	7943,7	7958,9	7970,0	7989,1	7980,0	7960,7	1,5	1,3	1,2	1,1	1,0	0,8	0,5
1078	7934,4	7947,3	7960,9	7972,3	7986,0	7971,7	7949,4	1,3	1,2	1,1	1,0	0,9	0,7	0,4
1095	7914,5	7927,3	7940,9	7952,2	7965,9	7951,5	7929,2	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,6
1145	7766,4	7767,8	7781,9	7793,0	7806,3	7792,3	7770,4	1,4	1,4	1,3	1,2	1,1	0,9	0,6
1345	7867,7	7868,6	7883,8	7893,4	7907,6	7885,6	7862,7	1,4	1,3	1,3	1,2	1,0	0,9	0,6
1524	7775,9	7777,2	7791,3	7802,4	7815,7	7801,6	7779,7	1,4	1,3	1,2	1,2	1,0	0,9	0,6
2330	8075,8	8087,1	8102,7	8111,8	8124,8	8094,2	8071,4	0,8	0,8	0,8	0,8	0,7	0,6	0,5
2515	8215,1	8225,0	8243,2	8251,6	8265,7	8234,4	8203,0	0,9	0,9	0,8	0,9	0,7	0,6	0,5
301	7947,5	7961,8	7978,8	7988,5	8001,6	7979,2	7956,6	0,5	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
302	8089,6	8101,0	8115,9	8125,0	8136,9	8106,1	8083,3	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
304	7986,2	7997,4	8012,1	8021,0	8032,7	8002,3	7979,8	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
310	8035,1	8046,3	8061,9	8071,6	8084,4	8053,7	8031,0	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
316	8175,6	8187,1	8202,9	8212,8	8225,7	8194,6	8171,5	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,3
347	8065,1	8076,4	8092,0	8101,9	8114,6	8083,8	8061,0	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
4028	7936,9	7949,7	7963,3	7974,7	7988,4	7973,8	7951,4	1,3	1,2	1,1	1,1	0,9	0,7	0,6
405	7804,6	7815,6	7830,5	7840,2	7852,4	7822,9	7800,8	0,8	0,8	0,9	0,9	0,9	0,8	0,8
410	7858,2	7869,2	7884,3	7894,0	7906,3	7876,3	7854,2	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,6
4130	7948,7	7961,5	7975,2	7986,6	8000,2	7985,8	7963,2	1,1	1,1	1,0	1,0	0,9	0,7	0,5
4140	7942,7	7955,5	7969,2	7980,5	7994,2	7979,9	7957,4	1,2	1,2	1,1	1,1	0,9	0,8	0,5
420	7809,7	7820,7	7835,6	7845,3	7857,5	7828,0	7805,9	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,6
430	7813,3	7824,2	7839,2	7848,8	7861,1	7831,3	7809,3	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,6

4320	7843,3	7855,8	7869,4	7880,6	7894,0	7879,7	7857,5	1,0	1,0	1,0	0,9	0,8	0,7	0,5
4626	7875,6	7885,2	7901,8	7911,5	7924,2	7894,4	7864,3	1,7	1,6	1,5	1,4	1,2	1,0	0,7
5132	7948,9	7960,9	7976,9	7986,8	8000,4	7962,2	7931,8	1,3	1,2	1,1	1,0	0,9	0,7	0,6
5140	7924,7	7934,3	7952,0	7960,2	7973,8	7943,6	7913,2	1,1	1,2	1,2	1,2	1,0	0,8	0,6
6150	7814,3	7823,6	7840,3	7850,1	7862,8	7833,1	7803,1	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7	0,5
8115	7895,2	7904,0	7921,5	7930,5	7944,0	7906,0	7876,0	1,2	1,1	1,0	0,9	0,8	0,6	0,5
8617	7891,1	7897,5	7915,8	7924,8	7938,3	7900,3	7870,2	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,7	0,5
8650	7914,1	7920,5	7938,8	7947,8	7961,5	7923,3	7893,0	1,0	0,9	0,8	0,8	0,7	0,5	0,4
8822	7996,3	8010,7	8027,6	8037,6	8050,7	8028,1	8005,3	1,0	0,9	0,9	0,8	0,7	0,6	0,4

Anexo 6. R1, b, c, R2

<i>AISI</i>	R_1	<i>b</i>	<i>c</i>	R^2	<i>AISI</i>	R_1	<i>b</i>	<i>c</i>	R^2
1008	0,29	-0,04	61,19	0,99	4 028	0,70	-0,03	50,75	1,00
1030	0,56	-0,03	55,63	0,98	405	3,65	0,01	27,35	0,91
1045	0,69	-0,04	54,90	0,98	410	3,60	0,01	27,43	0,91
1078	0,90	-0,03	51,03	0,99	4 130	1,20	-0,02	45,84	0,99
1095	0,99	-0,03	49,75	0,99	4 140	1,19	-0,02	46,51	0,99
1145	0,69	-0,03	53,48	0,99	420	3,65	0,01	27,88	0,93
1345	0,65	-0,03	51,67	0,99	430	4,17	0,02	23,01	0,97
1524	0,48	-0,03	53,79	0,99	4320	0,96	-0,02	45,98	1,00
2330	0,56	-0,03	48,14	1,00	4626	0,53	-0,03	51,17	0,96
2515	0,39	-0,03	47,58	1,00	5132	1,11	-0,03	50,08	0,99
301	4,16	0,01	17,12	1,00	5140	1,12	-0,03	48,92	0,99
302	4,30	0,01	16,48	1,00	6150	1,23	-0,02	47,00	0,93
304	4,41	0,01	16,26	1,00	8115	0,77	-0,02	44,96	1,00
310	5,01	0,01	15,52	0,98	8617	0,84	-0,02	44,30	1,00
316	4,19	0,01	17,33	0,99	8650	1,02	-0,02	43,59	1,00
347	4,30	0,01	16,10	1,00	8822	0,87	-0,02	43,94	1,00

Anexo 7. Primera aproximación con APF

AISI	Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)							Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)						
	0	100	200	300	400	600	800	0	100	200	300	400	600	800
1008	54,2	50,5	46,8	43,1	39,4	32,0	24,6	449,1	480,6	512,1	543,6	575,1	638,1	701,1
1030	51,7	48,6	45,5	42,4	39,3	33,1	26,9	449,5	480,7	511,9	543,1	574,3	636,7	699,1
1045	50,6	47,8	45,0	42,2	39,4	33,8	28,2	449,7	480,8	511,9	543,0	574,1	636,3	698,5
1078	48,8	46,4	44,0	41,6	39,2	34,4	29,6	450,0	480,8	511,6	542,4	573,2	634,8	696,4
1095	48,0	45,8	43,6	41,4	39,2	34,8	30,4	450,1	480,8	511,5	542,2	572,9	634,3	695,7
1145	50,6	47,8	45,0	42,2	39,4	33,8	28,2	449,7	480,8	511,9	543,0	574,1	636,3	698,5
1345	51,0	48,1	45,2	42,3	39,4	33,6	27,8	449,6	480,7	511,8	542,9	574,0	636,2	698,4
1524	52,5	49,2	45,9	42,6	39,3	32,7	26,1	449,4	480,7	512,0	543,3	574,6	637,2	699,8
2330	51,8	48,7	45,6	42,5	39,4	33,2	27,0	449,5	480,7	511,9	543,1	574,3	636,7	699,1
2515	53,2	49,7	46,2	42,7	39,2	32,2	25,2	449,2	480,6	512,0	543,4	574,8	637,6	700,4
301	20,2	22,3	24,4	26,5	28,6	32,8	37,0	454,9	480,8	506,7	532,6	558,5	610,3	662,1
302	18,9	21,1	23,3	25,5	27,7	32,1	36,5	455,1	480,7	506,3	531,9	557,5	608,7	659,9
304	18,0	20,3	22,6	24,9	27,2	31,8	36,4	455,3	480,7	506,1	531,5	556,9	607,7	658,5
310	12,7	15,3	17,9	20,5	23,1	28,3	33,5	456,2	480,5	504,8	529,1	553,4	602,0	650,6
316	19,9	22,0	24,1	26,2	28,3	32,5	36,7	454,9	480,8	506,7	532,6	558,5	610,3	662,1
347	19,0	21,2	23,4	25,6	27,8	32,2	36,6	455,1	480,8	506,5	532,2	557,9	609,3	660,7
4028	50,6	47,8	45,0	42,2	39,4	33,8	28,2	449,7	480,8	511,9	543,0	574,1	636,3	698,5
405	24,6	26,3	28,0	29,7	31,4	34,8	38,2	454,1	480,9	507,7	534,5	561,3	614,9	668,5
410	25,1	26,7	28,3	29,9	31,5	34,7	37,9	454,1	481,0	507,9	534,8	561,7	615,5	669,3
4130	46,2	44,4	42,6	40,8	39,0	35,4	31,8	450,4	480,9	511,4	541,9	572,4	633,4	694,4
4140	46,3	44,5	42,7	40,9	39,1	35,5	31,9	450,4	480,9	511,4	541,9	572,4	633,4	694,4
420	24,7	26,4	28,1	29,8	31,5	34,9	38,3	454,1	480,9	507,7	534,5	561,3	614,9	668,5
430	20,1	22,2	24,3	26,4	28,5	32,7	36,9	454,9	480,8	506,7	532,6	558,5	610,3	662,1
4320	48,3	46,0	43,7	41,4	39,1	34,5	29,9	450,1	480,9	511,7	542,5	573,3	634,9	696,5
4626	52,0	48,8	45,6	42,4	39,2	32,8	26,4	449,4	480,6	511,8	543,0	574,2	636,6	699,0
5132	47,0	45,0	43,0	41,0	39,0	35,0	31,0	450,3	480,9	511,5	542,1	572,7	633,9	695,1

5140	46,9	44,9	42,9	40,9	38,9	34,9	30,9	450,3	480,9	511,5	542,1	572,7	633,9	695,1
6150	45,9	44,1	42,3	40,5	38,7	35,1	31,5	450,5	480,9	511,3	541,7	572,1	632,9	693,7
8115	49,9	47,2	44,5	41,8	39,1	33,7	28,3	449,8	480,8	511,8	542,8	573,8	635,8	697,8
8617	49,3	46,8	44,3	41,8	39,3	34,3	29,3	449,9	480,8	511,7	542,6	573,5	635,3	697,1
8650	47,7	45,5	43,3	41,1	38,9	34,5	30,1	450,2	480,9	511,6	542,3	573,0	634,4	695,8
8822	49,0	46,5	44,0	41,5	39,0	34,0	29,0	450,0	480,9	511,8	542,7	573,6	635,4	697,2
	<i>Densidad (kg/m³)</i>							<i>Difusividad Térmica ((m²/s)10⁻⁵)</i>						
<i>AISI</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>
1008	7928,0	7929,0	7930,0	7931,0	7932,0	7934,0	7936,0	1,3	1,3	1,2	1,1	1,0	0,8	0,7
1030	7932,1	7932,9	7933,7	7934,5	7935,3	7936,9	7938,5	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
1045	7934,0	7934,7	7935,4	7936,1	7936,8	7938,2	7939,6	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
1078	7937,1	7937,7	7938,3	7938,9	7939,5	7940,7	7941,9	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7
1095	7938,6	7939,1	7939,6	7940,1	7940,6	7941,6	7942,6	1,2	1,1	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7
1145	7934,0	7934,7	7935,4	7936,1	7936,8	7938,2	7939,6	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
1345	7933,4	7934,1	7934,8	7935,5	7936,2	7937,6	7939,0	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
1524	7930,9	7931,7	7932,5	7933,3	7934,1	7935,7	7937,3	1,3	1,2	1,2	1,1	1,0	0,8	0,7
2330	7932,1	7932,9	7933,7	7934,5	7935,3	7936,9	7938,5	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
2515	7929,6	7930,5	7931,4	7932,3	7933,2	7935,0	7936,8	1,3	1,2	1,2	1,1	1,0	0,8	0,7
301	7986,1	7985,7	7985,3	7984,9	7984,5	7983,7	7982,9	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
302	7988,2	7987,8	7987,4	7987,0	7986,6	7985,8	7985,0	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
304	7989,8	7989,4	7989,0	7988,6	7988,2	7987,4	7986,6	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
310	7998,8	7998,5	7998,2	7997,9	7997,6	7997,0	7996,4	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,4	0,4
316	7986,4	7986,0	7985,6	7985,2	7984,8	7984,0	7983,2	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
347	7988,1	7987,7	7987,3	7986,9	7986,5	7985,7	7984,9	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5
4028	7934,1	7934,8	7935,5	7936,2	7936,9	7938,3	7939,7	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
405	7978,4	7978,0	7977,6	7977,2	7976,8	7976,0	7975,2	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
410	7977,6	7977,2	7976,8	7976,4	7976,0	7975,2	7974,4	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
4130	7941,6	7942,0	7942,4	7942,8	7943,2	7944,0	7944,8	1,2	1,1	1,0	1,0	0,9	0,8	0,7
4140	7941,4	7941,8	7942,2	7942,6	7943,0	7943,8	7944,6	1,2	1,1	1,0	1,0	0,9	0,8	0,7
420	7978,3	7977,9	7977,5	7977,1	7976,7	7975,9	7975,1	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6
430	7986,2	7985,8	7985,4	7985,0	7984,6	7983,8	7983,0	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5

4320	7938,0	7938,5	7939,0	7939,5	7940,0	7941,0	7942,0	1,2	1,1	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7
4626	7931,6	7932,4	7933,2	7934,0	7934,8	7936,4	7938,0	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,7
5132	7940,3	7940,7	7941,1	7941,5	7941,9	7942,7	7943,5	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,7
5140	7940,4	7940,8	7941,2	7941,6	7942,0	7942,8	7943,6	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,7
6150	7942,0	7942,4	7942,8	7943,2	7943,6	7944,4	7945,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,9	0,8	0,7
8115	7935,3	7935,9	7936,5	7937,1	7937,7	7938,9	7940,1	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7
8617	7936,3	7936,9	7937,5	7938,1	7938,7	7939,9	7941,1	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7
8650	7938,9	7939,4	7939,9	7940,4	7940,9	7941,9	7942,9	1,2	1,1	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7
8822	7936,8	7937,4	7938,0	7938,6	7939,2	7940,4	7941,6	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,7

Anexo 8. Cociente

AISI	Conductividad Térmica ($W(m\cdot K)$)							Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)						
	0	100	200	300	400	600	800	0	100	200	300	400	600	800
1008	10959	11491	11338	11505	11566	11417	11026	10710	10620	10225	9874	9858	9769	10359
1030	10363	10670	10898	10990	10992	10862	9799	10930	10760	10303	10075	10061	9924	11699
1045	10384	10745	10822	10923	10697	10134	8967	10927	10695	10244	9951	9898	9634	12100
1078	10120	10531	10378	10093	9873	9600	8702	11009	10985	10572	10216	10212	9879	13528
1095	10084	10350	10227	10031	9955	9605	8564	10362	10636	10257	9920	9917	9844	10491
1145	10225	10680	10677	10158	10177	9896	9207	10365	10265	9864	9524	9572	9461	11256
1345	9877	10135	10341	9840	9560	9624	8939	11099	10974	10580	10207	10259	10095	11926
1524	9988	10302	10660	10300	10167	10547	10218	10736	10624	10209	9854	9901	9779	11642
2330	9213	9323	9408	9532	9632	9572	9808	10063	9990	9629	9265	9503	9369	8982
2515	8900	8998	9084	9165	9275	9404	9842	10305	10165	9796	9390	9568	9412	8976
301	8418	8283	8044	7963	7762	7596	7309	10883	10693	10309	10086	10256	10198	10997
302	8599	8493	8180	8075	7977	7682	7399	10665	10481	10111	9895	10067	10019	10821
304	8893	8712	8370	8132	7923	7594	7254	10549	10359	9998	9805	9937	9896	10693
310	11764	10804	9819	9208	8583	7605	6837	10418	10253	9919	9747	9896	9887	10712
316	8574	8353	7884	7635	7533	7052	6616	10226	10030	9677	9477	9598	9546	10304
347	8410	8199	7815	7579	7490	7131	6800	10659	10427	10065	9826	9927	9849	10635
4028	9919	10145	10189	9992	10051	10109	10167	10348	10610	10222	9879	9872	9790	10391
405	10349	10955	10959	10717	10450	9993	9421	10286	10047	9677	9430	9509	9407	10132
410	10159	10810	10930	10719	10530	10072	9569	10244	9996	9625	9375	9450	9345	10064
4130	9940	9705	9809	10052	9626	9463	9290	10702	10617	10221	9887	9934	9821	11655
4140	10035	9778	10008	10137	9724	9488	9317	9886	9810	9443	9135	9179	9077	10782
420	10662	11066	11039	10961	10706	10154	9621	10237	9993	9626	9377	9454	9353	10087
430	10809	11136	11106	11161	10879	10350	9825	10004	9782	9442	9212	9303	9224	9957
4320	9459	9570	9563	9640	9646	9823	9671	10354	10266	9880	9555	9596	9479	11242
4626	9341	9883	10331	10528	10642	10636	10564	7812	7601	7278	7060	7167	7032	7530
5132	10474	10474	10469	10473	9976	9383	8827	11054	10836	10385	10020	10067	9923	9492

5140	10318	10119	10261	10350	9782	9212	8747	10159	9889	9475	9216	9333	9142	9485
6150	9949	10215	10372	10537	10579	9482	10358	10545	10275	9861	9575	9732	9567	10244
8115	9003	9129	9218	9320	9434	9815	10297	10365	10078	9665	9372	9504	9326	9977
8617	8972	9069	9139	9265	9294	9574	9939	10783	10502	10063	9766	9873	9683	10361
8650	9114	9179	9197	9260	9283	9381	9544	10604	10331	9898	9608	9716	9534	10206
8822	8952	9058	9121	9244	9314	9595	9969	11117	10826	10370	10062	10173	9977	10677
	<i>Densidad (kg/m³)</i>							<i>Difusividad Térmica ((m²/s)10⁻⁵)</i>						
<i>AISI</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>
1008	9929	9944	9960	9973	9989	9968	9938	11679	11458	11186	11071	10636	9771	8627
1030	10012	10027	10044	10057	10073	10053	10023	10915	10765	10804	10592	10135	9671	7064
1045	9993	10011	10030	10043	10066	10053	10027	11579	11196	10931	10753	10343	9709	7706
1078	9997	10012	10028	10042	10059	10039	10009	10355	10303	10106	9761	9214	8801	5499
1095	9970	9985	10002	10015	10032	10013	9983	10637	10443	10663	10652	10110	9522	8428
1145	9789	9790	9807	9820	9836	9816	9787	11117	11380	11267	11354	10760	10385	8433
1345	9917	9918	9936	9947	9964	9935	9904	10601	10865	11116	11224	10622	10309	8437
1524	9805	9805	9822	9835	9851	9831	9802	10964	10719	10806	10946	10438	10187	8443
2330	10181	10194	10213	10224	10239	10198	10167	6484	6630	7000	7496	6965	6783	6910
2515	10360	10371	10393	10403	10419	10377	10335	6635	6842	7262	7845	7349	7282	7562
301	9952	9970	9992	10005	10021	9994	9967	8919	8663	8662	8508	8278	8006	7584
302	10127	10142	10161	10173	10188	10151	10123	8430	8554	8910	8925	8628	8239	7792
304	9996	10010	10029	10041	10056	10019	9991	8793	8881	9245	9244	8968	8489	8005
310	10045	10060	10080	10092	10109	10071	10043	12138	12158	12493	12398	11847	10988	10185
316	10237	10252	10272	10285	10302	10264	10236	7223	7340	7675	7713	7505	7126	6797
347	10096	10111	10131	10144	10160	10123	10095	7804	7952	8281	8312	8117	7724	7310
4028	10003	10019	10035	10048	10065	10045	10015	10020	10139	10034	10003	9420	8858	8589
405	9782	9796	9816	9828	9844	9808	9781	13280	13622	14316	14563	14327	13954	13477
410	9850	9865	9884	9897	9913	9876	9849	10356	10661	11237	11450	11311	11041	10709
4130	10009	10025	10041	10055	10072	10053	10023	9440	9585	9780	9740	9160	8598	6760
4140	10002	10017	10034	10048	10064	10045	10016	10462	10623	10834	10792	10135	9508	7418
420	9789	9803	9822	9835	9851	9814	9788	10738	11005	11587	11769	11584	11281	10875
430	9783	9798	9817	9829	9845	9809	9782	12780	13048	13558	13700	13369	12835	12207

4320	9881	9896	9912	9926	9942	9923	9894	8601	8759	8962	8974	8484	8091	6457
4626	9929	9940	9960	9972	9987	9947	9907	13306	13111	13196	13195	12260	11510	10245
5132	10011	10025	10045	10057	10074	10025	9985	10848	10510	10461	10403	9636	8685	8223
5140	9980	9992	10014	10023	10040	10001	9962	9767	10736	11271	11662	10634	10129	9054
6150	9839	9850	9871	9883	9898	9860	9821	10332	10079	9993	9868	8997	8104	6814
8115	9950	9960	9981	9992	10008	9959	9919	9291	9118	9111	9091	8412	7758	6757
8617	9943	9950	9973	9983	10000	9950	9911	9682	9591	9560	9547	8845	8128	7045
8650	9969	9976	9999	10009	10026	9976	9937	7979	7877	7823	7790	7159	6543	5580
8822	10075	10092	10113	10125	10141	10110	10080	8176	8075	8062	8032	7445	6840	5897

Anexo 9. Parámetros d , e y f , R_2

AISI	<i>Conductividad Térmica ($W/(m\cdot K)$)</i>					<i>Calor específico ($J/(kg\cdot K)$)</i>				
	R^2	d	e	f	R^2	R^2	d	e	f	R^2
1008	0,811	-0,0033	2,5564	11056,3179	0,815	0,811	0,0046	-4,3952	10847,5732	0,916
1030	0,948	-0,0059	4,195	10319,2787	0,964	0,948	0,0086	-6,4333	11148,2455	0,854
1045	0,949	-0,0067	3,5226	10411,7858	0,996	0,949	0,011	-8,0689	11223,3238	0,816
1078	0,845	-0,0033	0,7103	10273,3815	0,945	0,845	0,014	-9,2944	11500,8363	0,78
1095	0,824	-0,0039	1,2416	10134,3208	0,973	0,824	0,0035	-3,1143	10614,0272	0,634
1145	0,981	-0,0029	0,7799	10411,0695	0,871	0,981	0,0085	-6,2853	10615,1275	0,844
1345	1,198	-0,0022	0,4262	10022,5432	0,802	1,198	0,0087	-6,5049	11352,5551	0,833
1524	1,121	-0,0017	1,4835	10111,1478	0,274	1,121	0,0089	-6,5562	10993,633	0,843
2330	1,458	-0,0005	1,0435	9227,0234	0,917	1,458	0,001	-2,0754	10060,2845	0,843
2515	1,555	0,0007	0,4956	8930,7466	0,979	1,555	0,0012	-2,5372	10297,1223	0,899
301	1,755	0,0005	-1,73	8418,5463	0,991	1,755	0,0052	-4,1635	10950,0695	0,923
302	1,756	0,0004	-1,8242	8606,2455	0,988	1,756	0,0051	-4,0591	10731,6846	0,923

304	1,851	0,001	-2,8444	8921,228	0,996	1,851	0,0051	-4,0269	10614,336	0,931
310	2,206	0,0047	-9,7759	11717,9503	0,998	2,206	0,005	-3,7593	10483,9954	0,931
316	2,032	0,0009	-3,174	8576,8904	0,99	2,032	0,0049	-3,9923	10288,685	0,933
347	1,913	0,0011	-2,8851	8411,9186	0,99	1,913	0,0053	-4,3884	10726,5414	0,938
4028	1,111	-0,0001	0,222	10021,4361	0,193	1,111	0,0035	-3,1479	10594,2027	0,654
405	1,138	-0,004	1,6206	10595,4277	0,888	1,138	0,0051	-4,4144	10351,9134	0,942
410	1,229	-0,0045	2,4519	10399,8653	0,855	1,229	0,0051	-4,4587	10307,6224	0,945
4130	1,015	-0,001	0,0318	9872,5239	0,73	1,015	0,0086	-6,2532	10959,2632	0,838
4140	1,093	-0,0013	0,1175	9977,1387	0,769	1,093	0,0079	-5,7898	10125,3724	0,838
420	1,157	-0,0038	1,4066	10818,5093	0,945	1,157	0,0051	-4,4463	10302,7382	0,943
430	1,247	-0,0038	1,5636	10919,3369	0,956	1,247	0,0049	-4,1521	10067,5841	0,938
4320	1,306	-0,0007	0,8726	9453,9692	0,798	1,306	0,0083	-6,0791	10601,4343	0,837
4626	1,174	-0,0045	4,9242	9415,8336	0,972	1,174	0,0039	-3,5628	7850,3823	0,937
5132	1,013	-0,0028	-0,0028	10526,7749	0,969	1,013	0,0018	-3,2869	11040,7046	0,941
5140	1,034	-0,0026	0,0013	10301,9135	0,934	1,034	0,0039	-4,0296	10176,5334	0,95
6150	1,062	-0,0014	1,0455	10119,9379	0,067	1,062	0,0051	-4,6096	10595,0824	0,931
8115	1,107	0,0012	0,5748	9031,034	0,998	1,107	0,0051	-4,6978	10413,8731	0,941
8617	1,172	0,0008	0,5192	8994,2794	0,993	1,172	0,0053	-4,8988	10843,2787	0,942
8650	1,183	0,0003	0,2962	9129,9601	0,988	1,183	0,0052	-4,8088	10664,1663	0,941
8822	1,202	0,0008	0,5769	8971,7663	0,997	1,202	0,0055	-5,0787	11179,7182	0,943
	<i>Densidad (kg/m³)</i>					<i>Difusividad Térmica ((m²/s)10⁻⁵)</i>				
AISI	R ²	d	e	f	R ²	R ²	d	e	f	R ²
1008	0,811	-0,0003	0,2568	9925,0826	0,947	0,811	-0,0018	-0,3518	11357,2743	0,991
1030	0,948	-0,0003	0,2614	10007,9479	0,948	0,948	-0,0069	4,3788	10447,3403	0,767
1045	0,949	-0,0003	0,286	9988,7482	0,95	0,949	-0,0022	1,5769	11128,0743	0,354
1078	0,845	-0,0003	0,2639	9992,4213	0,948	0,845	-0,0085	5,699	9876,9058	0,621
1095	0,824	-0,0003	0,264	9965,5287	0,948	0,824	0,0019	2,7166	10399,9397	0,981
1145	0,981	-0,0003	0,2133	9780,1288	0,849	0,981	-0,0043	4,758	10848,2257	0,853

1345	1,198	-0,0003	0,2162	9908,8741	0,841	1,198	-0,0056	6,0972	10317,9243	0,908
1524	1,121	-0,0003	0,2118	9795,9858	0,845	1,121	-0,0037	3,3306	10509,0447	0,597
2330	1,458	-0,0003	0,2574	10177,776	0,906	1,458	0,0001	3,032	6407,2978	0,905
2515	1,555	-0,0004	0,2823	10354,7075	0,928	1,555	-0,0006	3,4693	6540,4113	0,903
301	1,755	-0,0003	0,2922	9948,8448	0,944	1,755	-0,0794	2,3545	14539,2696	0,333
302	1,756	-0,0003	0,2646	10123,9515	0,905	1,756	-0,131	57,7521	10115,7026	0,368
304	1,851	-0,0003	0,2608	9992,4934	0,906	1,851	-0,1726	96,9743	7943,9	0,376
310	2,206	-0,0003	0,2713	10041,847	0,902	2,206	0,0238	-76,6473	27137,4574	0,108
316	2,032	-0,0003	0,2778	10233,2663	0,903	2,032	-0,0824	14,9804	11475,1485	0,337
347	1,913	-0,0003	0,2739	10092,9025	0,902	1,913	-0,1204	51,7238	9549,0465	0,365
4028	1,111	-0,0003	0,2625	9999,2597	0,947	1,111	0,0029	0,0273	10002,156	0,883
405	1,138	-0,0003	0,265	9778,7664	0,903	1,138	-0,4982	423,8594	-19401,3236	0,243
410	1,229	-0,0003	0,267	9846,877	0,902	1,229	-0,3727	299,8786	-11896,2049	0,287
4130	1,015	-0,0003	0,2663	10004,7145	0,949	1,015	-0,002	5,7247	9235,8459	0,983
4140	1,093	-0,0003	0,2663	9997,3422	0,949	1,093	-0,0027	6,4699	10231,5819	0,98
420	1,157	-0,0003	0,2651	9785,2027	0,903	1,157	-0,3998	338,6082	-15285,4134	0,246
430	1,247	-0,0003	0,2649	9780,0406	0,902	1,247	-0,1389	16,7653	21259,3729	0,33
4320	1,306	-0,0003	0,2614	9876,4864	0,948	1,306	-0,0033	5,2799	8385,236	0,965
4626	1,174	-0,0004	0,2736	9924,0312	0,927	1,174	-0,0017	1,5305	13011,973	0,26
5132	1,013	-0,0004	0,2907	10006,6989	0,915	1,013	0,0066	-1,0766	10781,8691	0,923
5140	1,034	-0,0004	0,2804	9974,9965	0,926	1,034	-0,0015	8,3435	9931,2421	0,948
6150	1,062	-0,0004	0,2777	9833,7266	0,924	1,062	0,0027	0,9884	10194,9849	0,943
8115	1,107	-0,0004	0,2777	9944,3239	0,908	1,107	-0,0003	1,1649	9099,5661	0,737
8617	1,172	-0,0004	0,272	9936,8617	0,899	1,172	-0,0004	1,6365	9515,4432	0,852
8650	1,183	-0,0004	0,2744	9962,359	0,898	1,183	0,0006	1,2651	7857,6555	0,918
8822	1,202	-0,0003	0,2832	10072,0504	0,941	1,202	-0,0002	1,3973	8027,5131	0,879

Anexo 10. Segunda aproximación.

<i>Conductividad Térmica (W/(m·K))</i>								<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>						
<i>AISI</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>
1008	59,7	56,0	51,9	47,6	43,1	33,7	24,4	492,8	502,1	517,3	540,2	572,3	671,3	827,9
1030	53,9	51,3	48,4	45,2	41,9	34,9	27,6	483,7	493,9	508,3	528,2	554,8	633,5	754,9
1045	52,7	50,4	47,8	45,0	42,0	35,6	28,9	483,8	494,0	508,3	528,0	554,6	633,1	754,4
1078	53,0	50,8	48,3	45,5	42,5	36,0	29,2	491,2	499,9	513,5	533,6	561,6	647,4	782,7
1095	52,6	50,5	48,2	45,6	42,7	36,6	30,1	493,0	501,1	514,2	533,7	561,1	645,5	779,0
1145	52,1	49,8	47,3	44,5	41,6	35,3	28,7	481,9	492,5	507,4	527,8	555,0	635,2	758,5
1345	49,0	46,8	44,5	42,0	39,4	33,8	28,0	471,3	484,3	500,9	522,2	549,4	625,7	738,9
1524	51,5	48,9	46,2	43,3	40,2	33,8	27,0	474,2	486,5	502,2	522,5	548,5	622,1	731,9
2330	47,3	44,7	42,2	39,7	37,3	32,3	27,3	465,0	480,1	498,0	519,8	546,4	617,4	718,8
2515	48,2	45,0	41,9	38,9	35,9	30,0	24,1	464,2	480,1	499,0	521,9	549,5	623,1	727,5
301	18,3	19,9	21,5	23,3	25,2	29,7	35,2	472,0	483,1	497,6	516,3	539,9	604,9	698,9
302	17,2	18,9	20,6	22,5	24,5	29,1	34,8	472,2	483,1	497,3	515,6	538,9	603,3	696,7
304	16,5	18,1	19,7	21,4	23,2	27,2	32,1	474,8	485,6	499,8	518,2	541,5	605,9	699,2
310	12,7	14,2	15,5	16,7	17,9	20,4	23,7	492,9	502,4	516,3	535,3	560,5	632,7	739,8
316	19,0	19,9	20,9	21,9	23,0	25,7	29,4	481,6	492,8	507,4	526,1	549,7	614,6	708,4
347	17,6	18,9	20,3	21,7	23,1	26,4	30,5	476,7	487,8	502,4	521,0	544,7	609,7	703,7
4028	49,8	47,7	45,4	43,0	40,5	35,0	29,3	475,0	487,0	502,4	522,3	547,9	620,6	729,4
405	24,0	26,1	28,1	30,1	32,0	35,8	39,4	478,5	486,3	497,8	514,1	536,2	601,4	701,1
410	23,9	25,8	27,6	29,4	31,2	34,5	37,7	474,9	483,8	496,7	514,5	538,2	607,1	711,1
4130	46,9	45,7	44,2	42,5	40,7	36,5	32,0	480,7	491,2	506,0	526,5	553,9	634,6	758,3
4140	45,8	44,6	43,4	41,9	40,4	37,0	33,3	476,7	487,7	502,2	521,3	546,0	616,7	723,1
420	23,9	26,0	27,9	29,9	31,9	35,6	39,1	477,7	485,7	497,5	514,1	536,5	602,4	703,0
430	19,0	21,3	23,5	25,8	28,0	32,3	36,3	475,2	483,3	495,4	512,5	535,5	603,0	705,2
4320	45,2	43,5	41,8	40,1	38,3	34,5	30,6	468,4	481,7	497,8	517,5	541,8	607,7	703,0
4626	50,3	47,8	45,2	42,4	39,5	33,3	26,9	472,1	484,9	501,3	522,3	549,2	624,7	737,0
5132	47,7	46,3	44,6	42,7	40,7	36,1	31,2	480,7	491,3	506,2	526,7	554,1	634,9	758,8

5140	47,3	45,9	44,2	42,4	40,3	35,8	30,9	479,6	490,4	505,7	526,6	554,5	636,3	761,4
6150	45,9	44,7	43,3	41,6	39,8	35,8	31,3	478,3	489,3	504,8	526,0	554,3	637,0	763,2
8115	49,2	47,2	45,0	42,7	40,2	35,0	29,5	475,3	487,1	502,3	522,1	547,5	619,8	728,2
8617	47,7	45,9	43,9	41,8	39,6	34,9	29,8	472,6	485,1	501,2	521,9	548,4	623,3	734,7
8650	46,0	44,5	42,8	41,0	39,1	35,0	30,5	472,5	484,9	500,9	521,6	548,1	623,1	734,5
8822	47,0	45,2	43,2	41,2	38,9	34,2	29,2	471,6	484,4	500,8	522,0	549,0	625,1	737,9
<i>Densidad (kg/m³)</i>								<i>Difusividad Térmica ((m²/s)10⁻⁵)</i>						
<i>ANSI</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>
1008	7858	7879	7901	7923	7944	7988	8031	1,6	1,5	1,4	1,3	1,1	0,8	0,5
1030	7871	7893	7914	7936	7957	8000	8044	1,4	1,3	1,3	1,2	1,0	0,8	0,6
1045	7873	7894	7916	7937	7959	8002	8045	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	0,8	0,6
1078	7869	7890	7911	7933	7954	7997	8039	1,4	1,4	1,3	1,2	1,0	0,8	0,6
1095	7869	7890	7911	7932	7954	7996	8039	1,4	1,3	1,3	1,2	1,0	0,8	0,6
1145	7875	7897	7918	7940	7961	8004	8047	1,4	1,3	1,2	1,1	1,0	0,8	0,6
1345	7895	7917	7938	7960	7981	8024	8068	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,6
1524	7885	7906	7928	7950	7971	8015	8058	1,3	1,3	1,2	1,1	1,0	0,8	0,6
2330	7925	7947	7969	7991	8013	8057	8101	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,6
2515	7937	7959	7981	8003	8025	8069	8114	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,7	0,6
301	8026	8047	8068	8089	8110	8152	8194	0,4	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,4
302	8028	8049	8070	8091	8112	8154	8196	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
304	8047	8068	8089	8110	8131	8173	8215	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
310	8130	8151	8173	8194	8216	8259	8302	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3	0,3
316	8079	8100	8122	8143	8164	8207	8249	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,4
347	8057	8078	8099	8120	8142	8184	8226	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
4028	7887	7909	7930	7952	7973	8016	8060	1,3	1,2	1,2	1,1	1,0	0,8	0,6
405	7934	7954	7975	7995	8016	8057	8098	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,5
410	7942	7963	7984	8004	8025	8066	8108	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,5
4130	7886	7907	7928	7949	7971	8013	8055	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,6
4140	7893	7914	7935	7956	7978	8020	8063	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,6
420	7935	7956	7977	7997	8018	8059	8100	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,6	0,5
430	7953	7974	7994	8015	8036	8077	8118	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,5	0,4

4320	7912	7933	7955	7976	7998	8041	8084	1,1	1,1	1,0	1,0	0,9	0,7	0,6
4626	7891	7912	7934	7956	7977	8021	8064	1,3	1,2	1,2	1,1	1,0	0,8	0,6
5132	7884	7905	7927	7948	7969	8012	8054	1,2	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,6
5140	7886	7907	7929	7950	7971	8013	8056	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,6
6150	7890	7911	7933	7954	7975	8018	8060	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,6
8115	7888	7909	7931	7952	7974	8017	8060	1,3	1,2	1,1	1,1	1,0	0,8	0,6
8617	7895	7917	7938	7960	7981	8024	8067	1,2	1,2	1,1	1,0	1,0	0,8	0,6
8650	7899	7920	7942	7963	7984	8027	8070	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,6
8822	7899	7920	7942	7963	7985	8028	8071	1,2	1,1	1,1	1,0	0,9	0,8	0,6

Anexo 11. Error APF

<i>Conductividad Térmica (W/(m·K))</i>								<i>Calor específico (J/(kg·K))</i>						
<i>AISI</i>	0	100	200	300	400	600	800	0	100	200	300	400	600	800
1008	0,58	3,56	2,07	4,01	5,59	8,11	11,08	2,40	1,64	1,21	0,64	0,94	7,15	12,28
1030	0,52	1,26	2,64	3,13	3,15	3,09	4,45	1,57	4,71	3,76	3,59	4,15	0,26	8,34
1045	0,29	2,01	1,97	2,53	0,41	3,78	12,54	1,56	4,09	3,16	2,33	2,47	3,18	12,03
1078	6,83	3,80	5,41	7,70	8,92	8,30	11,73	0,84	5,65	5,32	3,85	4,23	3,14	20,36
1095	7,99	6,23	7,49	8,92	8,75	8,74	13,50	5,38	2,05	2,03	0,77	1,26	3,25	6,30
1145	0,61	2,56	1,71	3,64	3,51	5,17	9,43	3,27	0,21	0,48	2,02	0,99	5,23	3,66
1345	2,92	4,21	5,16	0,83	4,31	4,41	11,18	5,87	8,92	8,10	6,11	7,19	2,64	12,73
1524	1,80	3,55	5,89	1,32	0,75	2,00	1,34	1,72	4,96	4,07	2,45	3,71	0,16	11,31
2330	0,89	1,50	1,62	1,94	1,77	1,82	3,03	2,73	0,02	1,03	3,21	0,12	3,39	12,64
2515	1,77	0,61	0,20	0,73	1,35	0,95	2,94	0,27	1,76	0,51	2,22	0,08	3,70	13,58
301	7,37	7,28	9,00	9,57	12,11	16,19	23,36	4,89	6,42	4,97	4,05	6,10	2,90	4,18
302	5,39	4,92	7,45	8,28	9,64	15,20	22,35	2,79	4,31	2,95	2,07	4,14	1,08	2,50
304	3,16	2,43	4,18	5,46	7,09	11,28	17,86	1,16	2,54	1,24	0,57	2,19	0,75	0,71

310	17,55	16,29	13,22	12,91	10,93	5,60	3,26	3,58	1,95	3,01	3,67	2,30	5,94	5,81
316	9,86	7,63	8,91	8,53	7,21	10,76	17,36	3,39	2,13	3,36	4,05	2,48	5,21	3,69
347	9,32	8,37	9,99	10,60	10,10	13,25	18,55	1,77	2,77	1,48	0,36	1,68	1,58	0,15
4028	0,80	1,65	0,89	2,02	2,19	2,56	2,17	2,04	4,75	4,16	2,71	3,44	0,37	0,50
405	6,02	10,69	9,44	6,00	2,57	2,81	8,48	2,38	0,63	1,30	1,95	0,45	3,80	3,39
410	6,70	12,11	12,17	9,08	6,49	1,20	3,70	2,05	0,64	1,59	2,56	1,38	5,25	5,28
4130	2,18	5,68	5,48	3,59	7,74	8,40	7,72	0,28	3,95	3,30	1,77	2,66	1,97	6,73
4140	1,40	2,58	1,46	1,16	5,92	9,09	10,89	6,58	3,27	3,84	5,04	3,76	6,77	3,54
420	9,84	12,45	10,88	9,07	5,74	0,59	5,90	2,68	1,04	1,76	2,51	1,08	4,53	4,08
430	14,03	16,04	14,56	14,22	10,67	4,71	0,36	4,23	2,68	3,43	4,27	2,97	6,64	6,52
4320	1,10	1,10	0,14	0,48	1,54	1,94	5,54	0,51	2,48	1,56	0,16	1,54	0,97	11,38
4626	3,30	0,93	4,30	5,31	5,69	4,75	3,99	25,62	24,66	25,69	26,61	25,06	28,34	28,58
5132	3,00	1,73	0,81	0,38	4,45	9,22	12,37	3,55	6,07	4,94	3,13	4,05	0,92	13,05
5140	2,22	1,02	0,50	0,11	5,68	10,30	12,60	4,61	3,03	4,15	5,12	3,60	8,93	13,41
6150	0,49	0,86	1,50	2,61	2,92	6,85	4,43	0,68	0,98	0,12	1,40	0,44	4,96	6,89
8115	8,63	8,64	8,83	8,72	8,32	5,52	1,05	1,92	0,53	1,53	2,56	0,40	4,33	4,39
8617	7,17	7,44	7,79	7,38	7,76	5,78	2,24	2,64	4,08	2,74	1,53	3,25	1,30	1,70
8650	5,41	6,02	6,89	7,11	7,54	7,32	5,73	1,03	2,46	1,09	0,11	1,56	2,93	3,33
8822	6,62	6,76	7,14	6,72	6,65	4,55	0,78	6,07	7,48	5,97	4,60	6,27	1,41	0,87
<i>Densidad (kg/m³)</i>								<i>Difusividad Térmica ((m²/s)10⁻⁵)</i>						
<i>AISI</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>	<i>0</i>	<i>100</i>	<i>200</i>	<i>300</i>	<i>400</i>	<i>600</i>	<i>800</i>
1008	0,18	0,07	0,04	0,17	0,27	0,99	1,80	1,84	3,70	4,90	3,53	3,87	0,30	8,05
1030	0,90	0,79	0,68	0,55	0,45	0,27	1,08	0,63	2,71	1,93	2,38	4,08	0,41	14,15
1045	0,71	0,62	0,54	0,41	0,38	0,27	1,05	5,47	1,26	0,72	0,84	2,07	0,74	6,24
1078	0,84	0,73	0,63	0,50	0,40	0,31	1,12	11,14	11,75	12,52	13,52	15,42	9,02	30,27
1095	0,58	0,47	0,37	0,25	0,15	0,56	1,36	9,86	11,57	8,70	6,61	8,02	2,35	6,03
1145	1,38	1,64	1,72	1,85	1,95	2,65	3,44	3,06	4,60	3,85	6,21	3,28	9,11	3,68
1345	0,34	0,60	0,68	0,83	0,92	1,73	2,54	9,14	9,92	11,76	13,24	8,60	11,90	2,31
1524	1,38	1,63	1,72	1,85	1,95	2,66	3,45	9,01	5,07	5,48	7,41	3,98	8,13	0,27
2330	1,90	1,76	1,68	1,51	1,40	0,46	0,36	27,32	27,46	24,50	19,64	25,13	24,63	17,63
2515	3,51	3,34	3,29	3,11	3,00	2,05	1,10	24,29	23,82	20,36	14,49	19,68	17,79	8,36

301	0,97	1,06	1,10	1,24	1,33	2,12	2,89	2,90	2,45	4,13	6,83	9,53	11,35	12,60
302	0,77	0,65	0,57	0,42	0,31	0,59	1,38	2,84	3,70	1,28	2,20	5,65	8,83	10,08
304	0,75	0,87	0,95	1,10	1,21	2,09	2,87	0,60	0,68	1,87	1,10	1,96	5,50	6,80
310	1,16	1,29	1,36	1,50	1,60	2,48	3,26	25,80	25,15	28,56	28,34	24,10	19,99	19,65
316	1,19	1,07	1,00	0,86	0,76	0,15	0,94	20,48	20,36	17,38	17,27	19,12	20,93	20,14
347	0,10	0,02	0,09	0,23	0,33	1,22	2,01	11,71	11,68	9,26	9,52	11,62	14,15	14,67
4028	0,63	0,52	0,42	0,29	0,19	0,53	1,34	0,84	1,04	2,48	2,26	6,43	6,36	1,70
405	1,63	1,74	1,81	1,94	2,04	2,91	3,67	33,09	34,50	40,59	43,86	43,54	48,69	60,94
410	1,06	1,18	1,24	1,38	1,48	2,35	3,13	8,02	9,09	14,26	16,66	16,82	20,96	30,95
4130	0,80	0,69	0,59	0,47	0,37	0,34	1,14	10,94	10,42	8,41	7,61	10,93	8,60	15,97
4140	0,64	0,53	0,43	0,30	0,21	0,50	1,31	2,68	2,96	4,93	5,65	1,63	3,95	5,51
420	1,58	1,70	1,77	1,90	2,00	2,87	3,63	8,64	9,51	14,67	16,97	16,78	20,97	30,51
430	1,76	1,87	1,94	2,07	2,17	3,04	3,81	34,12	34,48	38,66	40,43	38,76	41,34	50,02
4320	0,87	0,98	1,07	1,20	1,30	2,00	2,80	7,72	7,89	6,65	6,37	10,43	9,56	19,47
4626	0,19	0,34	0,41	0,56	0,67	1,57	2,48	35,54	31,46	31,45	31,95	24,40	24,15	23,51
5132	0,82	0,70	0,63	0,49	0,39	0,62	1,52	2,24	1,85	2,09	1,37	6,35	7,68	2,11
5140	0,49	0,34	0,30	0,13	0,04	0,87	1,77	6,93	1,27	6,43	11,53	4,26	8,49	13,24
6150	0,96	1,11	1,16	1,30	1,41	2,30	3,19	0,10	3,63	4,50	4,54	10,92	12,38	14,04
8115	0,10	0,06	0,12	0,27	0,37	1,38	2,28	8,19	11,13	11,54	11,30	16,63	18,12	19,99
8617	0,05	0,24	0,28	0,44	0,54	1,54	2,44	1,42	3,97	4,85	4,60	10,28	12,47	15,09
8650	0,19	0,00	0,04	0,19	0,29	1,30	2,19	18,42	20,80	21,83	21,86	27,18	29,30	32,60
8822	1,23	1,14	1,08	0,93	0,83	0,01	0,81	15,70	18,15	18,87	18,86	23,74	25,64	28,43

Anexo 12. Código para APF (Matlab R2018a)

```
%-----borra pantalla
clear all;
clc;
%-----Vector de temperaturas
T = [0 100 200 300 400 600 800] ;

%-----Matriz ceros
R=zeros (32,5);
%-----Calcular R1 y R2
for fila = 1:32;
    C = AISIVMcomp(fila,1) ;
    Mn= AISIVMcomp(fila,2) ;
    P = AISIVMcomp(fila,3) ;
    S = AISIVMcomp(fila,4) ;
    Si= AISIVMcomp(fila,5) ;
    Ni= AISIVMcomp(fila,6) ;
    Cr= AISIVMcomp(fila,7) ;
    Mo= AISIVMcomp(fila,8) ;
    V = AISIVMcomp(fila,9) ;

    R1=(C+Cr)^(0.5);
    R2=(Mn+S+P+Si+Ni+Mo+V)^(0.25);

%-----Correlacionando T con propiedad

    y=AISIVM(fila , : );
    p=polyfit(T,y,1);
    CD=corrcoef(T,y);
    CD(1,2);
    r=CD(1,2);
    rd=r^2;

    R(fila ,: )=[R1 R2 p rd];
end;

%-----Iteración uno
I1=zeros (32,2);
k1z=zeros (32,7);
for filaa = 1:32
    R1s=R(filaa, 1);
    Y1=(x1*(R1s^2)) + x2*(R1s) + x3 ;
    Y2=(x4*(R1s))+ x5 ;
    for col =1:7;
        Tc=T(1,col);
```

```

k1=Y1*Tc+Y2;
k1z(filaa ,col )= [k1];
end
I1(filaa ,: )=[Y1 Y2];
end;
%-----Cálculo del Error

Error=abs((AISIVM-k1z)./k1z).*100);

%-----2da aproximacion-----
k2=(AISIVM./k1z)*10000;

%----Correlacionando T con propiedad (polinomio ^2)

    Rr2=zeros(32 , 4);

    for filaaa = 1:32;
y1=k2( filaaa, : );
pppp=polyfit(T,y1,2);
ssss=gof.rsquare;
Rr2(filaaa,: )=[pppp ssss];
    end

%-----Calculando Valores de segunda iteración
I2=zeros (32,3);
kfz=zeros (32,7);
for fila4 = 1:32
    Rds=R(fila4, 2);
Y3=ppr2c(1,1)*(Rds^2)+ppr2c(1,2)*(Rds)+ppr2c(1,3);
Y4=ppr2d(1,1)*(Rds^2)+ppr2d(1,2)*(Rds)+ppr2d(1,3);
Y5=ppr2e(1,1)*(Rds^2)+ppr2e(1,2)*(Rds)+ppr2e(1,3);
for col2 =1:7;
    Tcd=T(1,col2);
kf=Y3*(Tcd^2)+(Y4*Tcd)+Y5;
kf=round(kf*1e3)/1e3;
kfz(fila4 ,col2 )= [kf];
end
I2(fila4 ,: )=[Y3 Y4 Y5];
end;

Ok=(kfz.*k1z)./10000;

Error2=abs((AISIVM-Ok)./Ok).*100);

```

Anexo 13. Código para KNN en RStudio

```
#Valores extremos
#para C
gcajaC<- boxplot(data$C)
gcajaC$out
data2 <-data[!(data$C %in% gcajaC$out),]
boxplot(data2$C)

#con los datos extremos eliminados
C_1c <- data2$C-mean(data2$C)
Mn_1c <- data2$Mn-mean(data2$Mn)
T_1c <- data2$T-mean(data2$T)
Ct_1c <- data2$CT-mean(data2$CT)
data2_1c<-
cbind(C_1c,Mn_1c,P_1c,S_1c,Si_1c,Ni_1c,Cr_1c,Mo_1c,T_1c,Ct_
1c)
data2_1c<- as.data.frame(data2_1c)
#reescalar los datos
C_1N<-rescale(data2_1c$C_1c)
Mn_1N<-rescale(data2_1c$Mn_1c)
T_1N<-rescale(data2_1c$T_1c)
Ct_1N<-rescale(data2_1c$Ct_1c)

#datos reescalados en una matriz
data2_1mn<-
cbind(C_1N,Mn_1N,P_1N,S_1N,Si_1N,Ni_1N,Cr_1N,Mo_1N,T_1N,Ct_
1N)
data2_1mn<- as.data.frame(data2_1mn)

#creando subconjuntos (relacion 80/20) sacando los valores
extremos
set.seed(123)
train5 <- createDataPartition(y=data2_1mn$Ct_1N, p=0.8,
list=FALSE, times = 1)
datos_train2 <- data2_1mn[train5,]
datos_test2 <- data2_1mn [-train5,]

# HIPERPARÁMETROS, NÚMERO DE REPETICIONES Y SEMILLAS PARA
CADA REPETICIÓN
#=====
particiones <- 10
repeticiones <- 5

# Hiperparámetros
```

```

hiperparametros <- data.frame(k = c(1, 2,3,4, 5, 6,
7,8,9,10))
set.seed(123)
seeds <- vector(mode = "list", length = (particiones *
repeticiones) + 1)
for (i in 1:(particiones * repeticiones)) {
  seeds[[i]] <- sample.int(1000, nrow(hiperparametros))
}
seeds[[(particiones * repeticiones) + 1]] <-
sample.int(1000, 1)

# DEFINICIÓN DEL ENTRENAMIENTO
#=====
control_train <- trainControl(method = "repeatedcv", number
= particiones,
                                repeats = repeticiones, seeds
= seeds,
                                returnResamp = "final",
verboseIter = FALSE,
                                allowParallel = TRUE)

# AJUSTE DEL MODELO#
#=====
set.seed(342)
modelo_knn <-
train(Ct_N~C_N+Mn_N+P_N+S_N+Si_N+Ni_N+Cr_N+Mo_N+T_N,
      data = datos_train,
      method = "knn",
      tuneGrid = hiperparametros,
      metric = "RMSE",
      trControl = control_train)

```

Anexo 14. Código para RNA en RStudio

```

particiones <- 10
repeticiones <- 5
#####CON NNET#####
hipernnet <- expand.grid(size = c(25,30,35) ,
                        decay = c(0.001, 0.1, 0.5))
set.seed(123)
seeds <- vector(mode = "list", length = (particiones *
repeticiones) + 1)
for (i in 1 : (particiones * repeticiones)) {

```



```

    seeds[[i]] <-sample.int(1000, nrow(hipernnet))
  }
  seeds[[(particiones * repeticiones) + 1 ]] <-
  sample.int(1000,1)

control_train <-trainControl(method = "repeatedcv" , number
= particiones,
                                repeats = repeticiones, seeds
= seeds,
                                returnResamp = "final",
verboseIter = FALSE,
                                allowParallel = TRUE)

set.seed(342)
modelo_nnetok <-
train(Ct_N~C_N+Mn_N+P_N+S_N+Si_N+Ni_N+Cr_N+Mo_N+T_N,
data=datos_train,
      method= "nnet",
      tuneGrid= hipernnet,
      metric = "RMSE",
      trControl = control_train,
      rang = c(1),
      MaxNWts = 1500,
      trace = TRUE)

```

Anexo 15. Resumen comparativo de métricas para conductividad térmica.

<i>Modelo por grupos</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-11,75	10,02	1,99	-11,64	10,43	1,96
1030	-10,11	10,74	1,82	-12,23	9,27	1,83
1045	-11,47	10,3	1,93	-11,38	10,77	1,95
1078	-12,52	10,41	1,71	-22,22	12,12	1,92
1095	-12,1	10,16	1,68	-11,92	12,04	1,73
301	-12,69	14,38	0,79	-10,68	10,61	0,67
302	-10,8	11,25	0,71	-11,37	10,5	0,72
304	-11,28	10,54	0,77	-11,9	11,31	0,74
310	-10,83	10,43	0,63	-10,1	9,96	0,6
316	-11,99	11	0,58	-10,72	11,31	0,57
347	-11,76	9,52	0,67	-11,09	9,09	0,67
405	-12,72	11,62	1,49	-12,27	12,73	1,44
410	-10,08	9,9	1,13	-9,33	10,26	1,06
420	-13,53	9,53	1	-15,05	9,73	0,98
430	-11,62	9,9	1,07	-12,11	8,96	1
4320	-11,19	10,58	1,24	-11,72	9,82	1,21
8115	-12,83	10,07	1,41	-11,29	10,3	1,33
8617	-12,97	10,53	1,61	-12,76	10,18	1,56
8650	-11,09	10,51	1,07	-9,21	10,04	1,01
8822	-11,65	9,57	1,37	-11,36	10,11	1,31

Anexo 16. Resumen comparativo de métricas para calor específico.

<i>Modelo por grupos</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-1,75	1,76	3,46	-2,86	3,38	7,22
1030	-1,44	1,74	3,72	-2,74	2,82	5,79

1045	-1,56	1,72	3,8	-2,24	2,85	4,94
1078	-1,64	1,62	3,95	-3,66	5,18	10,07
1095	-1,4	1,78	3,37	-6,7	3,65	9,42
301	-1,43	2,64	3,96	-2,5	3,36	5,26
302	-1,85	1,89	3,52	-2,55	2,51	5,47
304	-1,61	1,34	3,44	-2,21	2,21	4,57
310	-1,55	1,52	3,01	-1,63	2,35	3,58
316	-1,46	2,53	3,22	-3,15	2,44	4,02
347	-1,9	1,87	3,44	-2,17	3	4,42
405	-2,78	1,8	3,55	-2,49	2,27	4,18
410	-1,94	1,34	3,22	-2,38	2,25	4,04
420	-1,63	2,42	3,19	-2,49	2,48	4,29
430	-1,9	1,72	3,39	-2,99	2,58	3,98
4320	-1,75	2	3,6	-2,86	3,23	5,67
8115	-1,53	1,6	2,97	-2,57	2,82	4,08
8617	-2,42	1,5	3,77	-2,87	2,67	4,72
8650	-2,08	1,47	3,37	-2,15	2,47	5,05
8822	-3,05	8,59	4,84	-2,03	3,07	5,17

Anexo 17. Resumen comparativo de métricas para densidad.

<i>Modelo por grupos</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-0,09	0,11	3,09	-0,08	0,11	3,13
1030	-0,1	0,1	2,97	-0,1	0,11	2,93
1045	-0,09	0,08	3,19	-0,12	0,09	3,27
1078	-0,11	0,11	3,68	-0,1	0,13	3,62
1095	-0,11	0,1	3,31	-0,16	0,14	3,84

301	-1,73	1,24	14,03	-1,5	0,43	16,61
302	-0,1	1,24	14,03	-0,34	0,73	15,08
304	-0,71	0,11	5,82	-0,42	0,2	8,27
310	-0,11	0,1	3,29	-0,16	0,14	3,82
316	-0,11	0,11	3,54	-0,16	0,13	4
347	-0,1	0,91	4,04	-0,3	0,87	8,93
405	-0,12	0,1	3,13	-0,14	0,1	3,22
410	-0,11	0,1	3,17	-0,12	0,11	3,25
420	-0,12	0,11	3,17	-0,12	0,11	3,13
430	-0,11	0,11	3,05	-0,13	0,11	2,95
4320	-0,1	0,11	3,17	-0,11	0,11	3,2
8115	-0,1	0,1	3,22	-0,15	0,11	3,6
8617	-0,11	0,1	3,21	-0,15	0,12	3,67
8650	-0,11	0,1	3,28	-0,14	0,12	3,71
8822	-0,11	0,08	3,27	-0,11	0,19	3,82

Anexo 18. Resumen comparativo de métricas para difusividad.

<i>Modelo por grupos</i>						
	<i>KNN</i>			<i>RNA</i>		
	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>	<i>Mínimo</i>	<i>Máximo</i>	<i>MAE</i>
1008	-9,74	8,04	0,035	-10,33	9,49	0,037
1030	-9,48	8,64	0,037	-13,4	9,87	0,038
1045	-9,47	8,54	0,038	-10,79	11,34	0,039
1078	-9,52	7,88	0,031	-32,99	12,48	0,046
1095	-8,49	8,2	0,033	-11,84	12,35	0,038
301	-9,72	12,97	0,016	-8,96	11,79	0,016
302	-8,8	8,1	0,012	-9,65	8,72	0,013
304	-10,26	8,5	0,013	-9,11	8,65	0,012
310	-11,66	9,57	0,013	-12,16	9,49	0,013
316	-8,75	10,06	0,012	-9,91	9,98	0,012

347	-13,26	8,75	0,012	-14,97	8,9	0,012
405	-10,09	9,45	0,027	-9,97	10,08	0,026
410	-10,2	8,24	0,022	-10,03	8,02	0,022
420	-9,23	9,1	0,021	-10,92	8,99	0,021
430	-9,96	8,01	0,021	-10,55	8,09	0,021
4320	-10,04	8,8	0,029	-11,51	10,29	0,029
8115	-8,55	9,24	0,03	-10,87	9,18	0,021
8617	-10,37	8,03	0,031	-12,57	8,26	0,033
8650	-10	9,55	0,023	-10,33	9,23	0,024
8822	-11,68	8,75	0,027	-8,18	11,08	0,026

Anexo 19. Código para realizar el cálculo del intervalo de predicción para KNN

```

library(class)
predictions<-as.numeric(pred_knntestSN)
B<-1000
bootstrap_samples<-matrix(nrow=B, ncol=length(predictions))
for (i in 1:B) {
  bootstrap_index<-sample(length(predictions), replace=TRUE)
  bootstrap_samples[i, ]<-predictions[bootstrap_index]
}
lower_interval<-apply(bootstrap_samples, 2, quantile,
probs=0.025)
upper_interval<-apply(bootstrap_samples, 2, quantile,
probs=0.975)
prediction_interval<-cbind(predictions, lower_interval,
upper_interval)

```

Anexo 20. Intervalos de predicción

$\lambda(W/m \cdot K)$ Grupo 2			$\lambda(W/m \cdot K)$ Grupo 3			$\lambda(W/m \cdot K)$ Grupo 4		
T(°C)	Límite inferior	Límite superior	T(°C)	Límite inferior	Límite superior	T(°C)	Límite inferior	Límite superior
0	11,10	19,58	0	18,46	32,91	0	30,91	51,07
100	11,80	19,67	100	19,94	34,80	100	28,31	49,02
200	12,40	19,75	200	20,93	37,07	200	30,61	48,08
300	13,85	20,30	300	21,65	38,51	300	27,25	45,32
400	13,44	21,36	400	22,77	39,61	400	24,37	42,92
600	13,92	22,15	600	23,41	41,07	600	21,1	36,87
800	15,56	24,92	800	25,67	45,07	800	17,56	31,24
$C_p(J/kg \cdot K)$			$\rho(kg/m^3)$			$\alpha(m^2/s)$		
T(°C)	Límite inferior	Límite superior	T(°C)	Límite inferior	Límite superior	T(°C)	Límite inferior	Límite superior
0	457	499	0	7858	8100	0	0,310	0,497
100	474	519	100	7880	8110	100	0,320	0,484
200	482	526	200	7890	8132	200	0,338	0,472
300	485	542	300	7905	8140	300	0,353	0,472
400	519	577	400	7898	8151	400	0,317	0,462
600	560	628	600	7877	8120	600	0,301	0,446
800	671	735	800	7865	8085	800	0,293	0,419