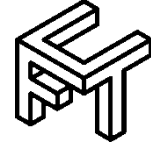




Universidad de Matanzas
Facultad de Ciencias Técnicas



MODELACIÓN EMPÍRICA DE PROPIEDADES TERMO FÍSICAS DE ACEROS EMPLEADOS EN LA INDUSTRIA ENERGÉTICA.

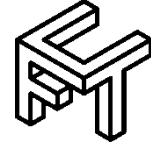
Tesis Presentada como Requisito Parcial
para la Obtención del Título de
Máster en Tecnología Energética

Autor: Ing. Gabriel Roque Villalonga

Matanzas, 2022



Universidad de Matanzas
Facultad de Ciencias Técnicas



MODELACIÓN EMPÍRICA DE PROPIEDADES TERMO FÍSICAS DE ACEROS EMPLEADOS EN LA INDUSTRIA ENERGÉTICA.

Tesis Presentada como Requisito Parcial
para la Obtención del Título de
Máster en Tecnología Energética

Autor: Ing. Gabriel Roque Villalonga

Tutor: Prof. Asist., Ing. Yanán Camaraza Medina, M.Sc., Dr. C.

Matanzas, 2022

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 termo físicas 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, 20 de enero de 2022.

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 las propiedades objeto de estudio, conductividad térmica y calor específico, por lo que se proponen modelos empíricos para la predicción de dichas propiedades. Se emplean el método de ajuste progresivo de funciones y redes neuronales artificiales, los mejores modelos se obtienen con algoritmo de entrenamiento Levenberg-Marquardt. Para el desarrollo de los modelos se dispone de 20 832 mediciones experimentales de cada propiedad, realizadas por el método del flash laser. Los modelos propuestos abarcan un grupo de 32 marcaciones de acero, presentan un coeficiente de determinación R^2 de 0,99 para conductividad térmica y calor específico, superando en alcance y presentando menor incertidumbre que los modelos existentes en la bibliografía consultada y disponible. 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: Modelos empíricos, conductividad térmica, calor específico, acero.

ABSTRACT

Thermo-physical properties of steel are a mandatory domain in engineering for the construction of equipment in the energetic industry. The relationship between the chemical composition and the working temperature of the material does not present a linear relationship with the properties under study, thermal conductivity and specific heat, so empirical models are proposed for the prediction of these properties. The method of progressive adjustment of functions and artificial neural networks are used; the best models are obtained with the Levenberg-Marquardt training algorithm. For the development of the models, 20 832 experimental measurements of each property are available, carried out by the laser flash method. The proposed models cover a group of 32 steel markings, present a determination coefficient R^2 of 0,99 for thermal conductivity and specific heat, exceeding in scope and presenting less uncertainty than the existing models in the consulted and available bibliography. Software that allows the user to obtain the values of the properties under study knowing the chemical composition and the working temperature of the material was created.

Keywords: Empirical models, thermal conductivity, specific heat, steel.

TABLA DE CONTENIDO

Introducción	1
Capítulo 1. Estado del Arte.....	5
1.1 Acero	5
1.2 El sistema Hierro-Carbono	6
1.3 Transformaciones microestructurales del acero de 0 a 800°C.....	7
1.4 Propiedades de los aceros	8
1.4.1 Conductividad térmica	10
1.4.2 Calor específico	11
1.5 Clasificación de los aceros.	11
1.6 Influencia de los elementos de aleación en las propiedades del acero.	12
1.7 Propiedades termodinámicas de los aceros.....	15
1.8 Modelación de propiedades del acero	18
1.8.1 Modelación de propiedades termofísicas del acero.	20
1.8.2 Principios de la inteligencia artificial.	22
1.9 Método flash laser.....	25
1.10 Conclusiones parciales del capítulo	26
Capítulo 2 Materiales y Métodos.....	27
2.1. Datos experimentales disponibles.....	27
2.1.1 Mediciones experimentales de conductividad térmica y calor específico.	29
2.2 Método de ajuste progresivo de funciones	29
2.3 APF aplicado a la conductividad térmica.	31
2.4 APF para calor específico.	35

2.5 Aplicación de inteligencia artificial en el caso de estudio.....	38
2.6 Elaboración de <i>software</i> para emplear los métodos obtenidos.....	39
2.7 Conclusiones parciales del capítulo.....	41
Capítulo 3 Análisis de los Resultados.....	43
3.1 Resultados obtenidos con APF	43
3.1.1 APF para conductividad térmica.....	43
3.1.2 APF para calor específico.....	43
3.2 Comparación del modelo APF con valores normados.....	44
3.2.1 Comparación para conductividad térmica	45
3.2.2 Comparación para calor específico.....	46
3.3 Resultados obtenidos con RNA	47
3.3.1 RNA para conductividad térmica	47
3.3.2 RNA para calor específico.....	48
3.4 Comparación del modelo RNA con valores normados.	48
3.5 Comparación entre los métodos empleados.....	49
3.5 Ejecución de <i>SteelPTF 1.0</i>	50
3.6 Conclusiones parciales del capítulo.....	51
Conclusiones.....	52
Recomendaciones	53
Referencias Bibliográficas.....	54

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 and 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 (Narayana et al., 2020, Ahadi Akhlaghi et al., 2020, Reddy et al., 2009) y que la mayoría de las relaciones entre estos factores son no lineales (Guo et al., 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 et al., 2020), aun así los modelos predictivos existentes no abordan de manera efectiva las propiedades antes mencionadas.

Thibault and Grandjean (1991) establecen 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 *et al.* (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 *et al.* (2014) utilizan el método de elementos finitos (MEF) para resolver eficazmente el problema de la conducción de calor, obteniendo valores de error inferiores al 3%. La densidad de materiales procesados con láser de fusión selectiva es directamente influenciada por los parámetros de dicho proceso, 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 et al. (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:

En la actualidad los modelos disponibles no son capaces de predecir las propiedades termofísicas de los aceros usados en la industria energética, y su dependencia con la composición química y la temperatura, lo cual dificulta el proceso de selección al requerirse del uso de métodos aproximados para su predicción.

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

Con el uso de datos experimentales disponibles se pueden crear modelos que permitan la predicción de propiedades termofísicas de los aceros utilizados en la construcción de equipos en la industria energética.

Para validar la hipótesis se propone el siguiente *objetivo general*:

Desarrollar a partir de los datos experimentales disponibles modelos que sean capaces de predecir las propiedades termofísicas requeridas con una incertidumbre menor a los métodos actualmente empleados.

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.
2. Establecer los límites del modelo propuesto en la investigación.
3. Aplicar métodos de ajuste progresivo de funciones (APF) y RNA para obtener modelos de las propiedades objeto de estudio.
4. Implementar los métodos en el *software* Matlab R2019a y comparar su nivel de incertidumbre.
5. Crear aplicación informática 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 los aceros usados en la industria energética, cuyos valores muestren un margen de incertidumbre inferior al obtenido con los métodos aproximados usados en la actualidad.

CAPÍTULO 1. ESTADO DEL ARTE

En este capítulo se realiza una reseña del impacto del empleo del acero para la humanidad, con un enfoque técnico y social. Se detalla la sección del diagrama hierro-carbono en la zona de aceros y en el rango de temperaturas de 0-800°C, así como las reacciones invariantes que ocurren en ella. Es descrita la influencia de los elementos de aleación sobre la microestructura del acero y como esta afecta sus propiedades. Se presentan las propiedades en que se centra la investigación, dígase, conductividad térmica y calor específico. Se presentan ecuaciones de la termodinámica de las aleaciones de interés práctico para la metalurgia. Los resultados obtenidos en investigaciones destacadas en la bibliografía consultada y disponible son analizados. La teoría fundamental que sustenta la RNA es analizada.

1.1 Acero

En la historia de la humanidad el desarrollo de materiales ha sido clave para avances militares, industriales y agrícolas. El desarrollo de las sociedades se ha visto estrechamente relacionado con la capacidad de sus miembros para producir y manipular materiales, es tal su significación que se denominan las primeras etapas de la civilización como Edad de Piedra, Edad de Bronce y Edad de Hierro, esta última comienza en el año 1200 a.C.(Alpizar, 2004). El desarrollo de la división social del trabajo, la dominación de unos pueblos sobre otros, las técnicas artesanales y el comercio han sido influenciadas históricamente por el descubrimiento de nuevos y mejores materiales (Rueda Peiro et al., 1990).

En el año 1868 se considera que nace la metalografía como ciencia, a partir de la obra de D.K. Chernov (1868), en este trabajo se da la primera idea de diagrama Fe-C.

Posteriormente realiza una representación gráfica con las líneas más importantes del diagrama Fe-C (Leont'ev et al., 2021)

Se nombra de manera ordinaria acero a las aleaciones de hierro-carbono si tienen menos del 2% de C, si tienen más de 2% de C son fundiciones. En la actualidad la técnica ha realizado aleaciones con base de Fe con muy bajo porcentaje de C, por lo que se acepta llamar aceros a aleaciones con más del 50% de Fe y se nombra simplemente aleaciones para las que tienen menos del 50% de Fe en su composición (Lajtin, 1977). Tal es el volumen de producción de aceros y aleaciones en la actualidad que supera en más de diez veces la producción de todos los demás metales juntos.

La producción de acero bruto en los últimos cinco años ronda los 1 800 millones de toneladas métricas como promedio anual, del cual aproximadamente un tercio proviene de la industria del reciclaje, notándose un aumento histórico gradual. El principal productor de acero es China, quien produce actualmente alrededor del 35% del total (worldsteel, 2021).

En cuanto a impacto económico, se plantea que por cada un dólar de valor que se consigue dentro de la industria del acero se posibilitan otros 2,50 dólares de actividad de valor agregado como resultado de las compras de materias primas, equipos, energía y servicios, generando más de 1,2 billones de dólares de valor agregado en las cadenas de suministro.

El sector representa un 3,8% del producto interno bruto mundial (Monvaga, 2020).

1.2 El sistema Hierro-Carbono

Los principios básicos del desarrollo microestructural se pueden explicar mediante el diagrama de equilibrio hierro-carbono (Shackelford and Guemes, 1998). Este diagrama es un mapa de las fases que existen en el hierro a diversos contenidos de carbono y temperaturas en condiciones de equilibrio. Para este trabajo solo es de interés la zona del

diagrama desde 0 a 800°C y con masa porcentual de carbono correspondiente a los aceros (hasta 2,11%).

Al ser los metales cuerpos cristalinos la disposición de sus átomos en el espacio responde a una geometría ordenada de forma tal que al solidificar el material los átomos siguen un patrón tridimensional repetitivo (Reed-Hill, 1982). Para este estudio es necesario conocer las determinadas disposiciones cristalinas.

Red cúbica centrada en el cuerpo (BCC): presenta un átomo en el centro que es colonial con cada átomo de las esquinas, si es visto desde la red cúbica cada uno puede ser centro o esquina por su disposición espacial. Su densidad de compactación es 68%. Red cúbica centrada en las caras (FCC): en esta red los átomos están compactados tan cerca cómo es posible. Tiene cuatro planos octaédricos o compactos, presenta una densidad de compactación de 74%. Los metales que presentan esta estructura tienen la característica de soportar deformación plástica severa. Red hexagonal compacta (HCP):similar a la FCC presenta una densidad de compactación de 74%, tiene forma de prisma recto de base hexaédrica (Askeland et al., 2017).

1.3 Transformaciones microestructurales del acero de 0 a 800°C.

En la zona enmarcada en esta investigación, dígase aceros en el rango de temperaturas de 0 a 800°C, ocurren determinadas reacciones invariantes, estas se analizan y detallan bajo condiciones de equilibrio, en esta zona también está la línea de temperatura a la que el hierro pierde sus propiedades magnéticas 768°C (Smith et al., 2006). En la figura 1.1.a es mostrada la reacción eutectoide, la cual ocurre a 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 presenta la fase austenita (γ) (Machado et al., 2021), la estructura cristalina de la fase γ es del tipo FCC. Con temperaturas inferiores a 727°C la composición es de perlita, que consiste en ferrita (α) con estructura cristalina BCC, que podrá existir en todo el rango de temperatura estudiado en este trabajo, y cementita (Fe_3C), que se encuentra a la derecha de $\overline{x x'}$ y por debajo de A_3 .

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

Al trazar una recta vertical a la derecha de 0,77% de C ($\overline{z z'}$) es estará en presencia de una reacción hipereutectoide, presentada 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 , al disminuir la temperatura aumenta el tamaño de grano de la cementita. Bajo 727°C coexisten la cementita proeutectoide y la perlita.

1.4 Propiedades de los aceros

El término acero se utiliza para el gran grupo de más de 5000 variaciones de aleaciones de hierro, carbono y otros elementos como silicio, níquel, molibdeno, vanadio, cromo, que se agregan para modificar propiedades específicas en la que estos influyen. La ventajosa combinación de propiedades, elevada resistencia mecánica, dureza y plasticidad, respalda el uso extensivo de este metal (Dong et al., 2020). El acero es fácil de reciclar y la producción

a partir de reciclado consume hasta diez veces menos energía (Harvey, 2021, Akkaltham and Taghipour, 2021)

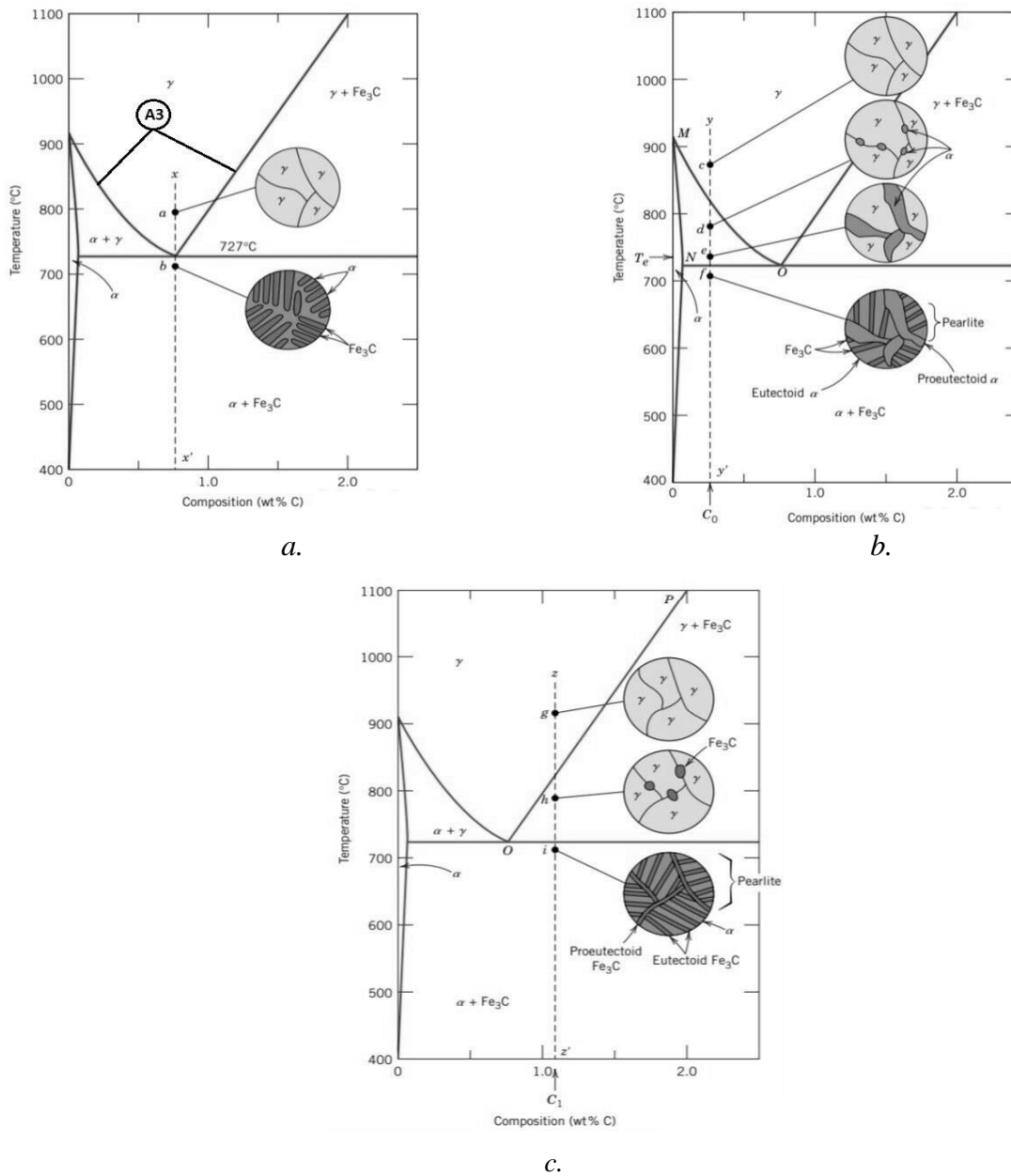


Figura 1.1. Transformaciones microestructurales del acero. a) Reacción eutectoide
b) Reacción hipoeutectoide c) Reacción hipereutectoide (Callister, 2019).

Ningún otro material usado en la ingeniería ofrece tanta versatilidad, variedad de formas, acabados, resistencias y rangos de temperatura de trabajo. Según las condiciones de un

determinado diseño pueden requerirse ampliar una característica o reducirla manteniendo intactas otras de sus propiedades.

Las propiedades que implican la respuesta de un material ante un determinado suministro de calor son denominadas propiedades termofísicas (Callister, 2019). El ingeniero, para realizar un diseño efectivo de sistemas térmicos y componentes sometidos a cambios de temperatura, deberá dominar los valores de conductividad térmica y calor específico de los materiales a emplear (Somasundharam and Reddy, 2020). Se encuentran disponibles en la literatura los valores de estas propiedades para algunos grados de acero (Xie et al., 2021).

Es ampliamente aceptado que las propiedades de una aleación de acero están condicionadas por su composición química (Hernandez-Duran et al., 2021, Aguirre Gutiérrez and Cabel Mostacero, 2019), temperatura de trabajo y microestructura (Narayana et al., 2020, Ahadi Akhlaghi et al., 2020, Reddy et al., 2009) y que la mayoría de las relaciones entre estos factores son no lineales (Guo et al., 2019).

1.4.1 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. 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, la transmisión de energía ocurre por los electrones libres de la red (Medina, 2020). Se define como se muestra en la ecuación (1.1), en el sistema internacional de unidades se expresa en $W/(m \cdot K)$.

(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 . A es el área, en m^2 . $|\nabla T|$ es el gradiente de temperatura en la dirección del flujo de calor, en K

1.4.2 Calor específico

Es una magnitud física que se define como la cantidad de calor que hay que suministrar a una unidad de masa de un material para elevar su temperatura en una unidad. 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 podemos escribir la ecuación (1.2), donde c es el calor específico, destáquese que es diferente para cada material (Cengel and Boles, 2007). En el sistema internacional de unidades se expresa en $J/(kg \cdot K)$.

(1.2)

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

1.5 Clasificación de los aceros.

Los aceros pueden clasificarse en grupos atendiendo determinada característica común. La composición química es la base más utilizada para identificar y asignar designaciones estándar a los aceros. Aunque el carbono es el principal elemento de endurecimiento y fortalecimiento del acero, ningún elemento individual controla sus características (Kutz, 2015). El efecto combinado de varios elementos influye en la respuesta al tratamiento térmico, dureza, resistencia, microestructura, resistencia a la corrosión y conformabilidad.

Los aceros estándar se pueden dividir ampliamente en tres grupos principales: aceros al carbono, aceros aleados y aceros inoxidables (Handbook, 1990).

Existen asociaciones comerciales, sociedades de ingenieros profesionales, organizaciones de normalización e industrias privadas han desarrollado sistemas de numeración diferentes para metales y aleaciones para su propio uso. El código numérico utilizado para identificar el metal o la aleación puede o no estar relacionado con una especificación, que es una declaración de los requisitos técnicos y comerciales que debe cumplir el producto (Cverna, 2006). Debido a su amplia aceptación a nivel mundial, en este trabajo es utilizada la nomenclatura dada por la *American Iron and Steel Institute* (AISI) y la *Society of Automotive Engineers* (SAE), siendo resumida en el Anexo 1 (Bringas, 2002).

1.6 Influencia de los elementos de aleación en las propiedades del acero.

Cada elemento de aleación en particular influye en la estructura y propiedades del acero, modificando las características del diagrama Fe-C (Yikang, 1999). Se presentan 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, influye considerablemente en la dureza y la resistencia, además es económico (Salas and Magdaleón, 2009). 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 en el 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 et al., 2018).

El manganeso (Mn) es un elemento fundamental en los aceros al carbono, de baja aleación y aleados. Se emplea 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 se emplea 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). Reduce la temperatura de transformación eutectoide y reduce el contenido de carbono eutectoide (Ashong et al., 2019). 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*), se emplean cuando se requiere una elevada resistencia al desgaste (Jafarian et al., 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). Se ha detectado en estudios 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 and Stumpf, 2008). Se agrega a una clase especial de aceros llamados aceros resulturizados que tienen una maquinabilidad mejorada son denominados aceros de mecanizado libre (Nickel et al., 2018).

El silicio (Si) se agrega 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 ya que forma inclusiones de óxido que pueden disminuir la ductilidad, tenacidad y resistencia a la fatiga (Sun et al., 2018). Es un estabilizador de ferrita y se encuentra en algunos aceros inoxidable (Li et al., 2015).

El níquel (Ni) mejora la templabilidad del acero, por lo que se emplea 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 se agrega 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 níquel, 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 (Meng et al., 2018). Además de la templabilidad y los efectos de la solución sólida, el cromo 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 (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 sollicitaciones de resistencia al desgaste. Es agregado para minimizar la fragilización por temple en aceros de baja aleación, que ocurre cuando los aceros de baja aleación se templean en el rango de temperatura de 260–370°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 y, debilitando los límites(Gramlich et al., 2020). El molibdeno también mejora la resistencia a la fluencia de los aceros de baja aleación a temperaturas elevadas y se usa en rotores y otras partes de generadores en plantas de energía eléctrica (Shackelford and Guemes, 1998).

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

1.7 Propiedades termodinámicas de los aceros.

Las propiedades del acero se relacionan con su microestructura y esta a su vez depende también de la termodinámica de las fases (Eshkabilov et al., 2021). La determinación de la probabilidad de formación y estabilidad relativa de varias fases a partir del cálculo de la actividad de varios componentes y la discusión de la influencia de los elementos en la actividad del carbono, que proporciona información sobre la estabilidad de las principales fases ricas en carbono de las aleaciones de hierro-carbono, es decir, grafito y cementita son presentados por Stefanescu and Katz (1988).

En el sistema Fe-C se puede describir la solubilidad de carbono en hierro para las fases de interés de esta investigación como se plantea en las ecuaciones (1.3) y (1.4) (Gokcen, 2012, Raghavan, 2007).

Para el sistema meta estable, dígame Fe-Fe₃O, se plantea que:

Para la austenita:

$$wt\% C_{\max} = -0,628 + 1,222 \times 10^{-3} t + 1,045 \times 10^{-6} t^2 \quad (1.3)$$

Para la ferrita:

$$wt\% C_{\max} = 1,8 \times 10^3 \exp\left(-\frac{10,908}{T}\right) \quad (1.4)$$

Dónde: t es la temperatura. en °C. T es la temperatura, en K .

La predicción de la estabilidad de fases se basa mayormente en el conocimiento de la actividad de varios elementos. En las aleaciones Fe-C un aumento en la actividad del carbono en el líquido es indicativo a una mayor capacidad del carbono para separar como grafito, es decir, la actividad del carbono es una medida de una tendencia creciente de la aleación para solidificar como el sistema estable (Chun, 2022). Por otro lado, una actividad disminuida del carbono refleja el comportamiento promotor de carburo en el sistema, es decir, la solidificación metaestable es tendencia. Para la actividad de carbono en el sistema Fe-C la ecuación (1.5) presenta alta correlación con resultados experimentales (Neumann and Dötsch, 1975).

$$\ln \gamma_C = \frac{2714}{T} - 2 + \left(\frac{2920}{T} + 4,01\right)(2X_C - X_C^2) \quad (1.5)$$

Donde: X_C -fracción molar de C. γ_C - actividad del C. T es la temperatura, en K

Para el metalúrgico en ejercicio involucrado en la fundición para producción de hierro, una de las principales aplicaciones de la termodinámica del sistema Fe-C es el cálculo de las

correlaciones estructura-composición. Los llamados diagramas estructurales se utilizan para este propósito (Bramfitt and Benschoter, 2002).

Los elementos que conforman una aleación hacen que la temperatura eutectoide del diagrama de fases Fe-Fe₃C aumente o disminuya. Se considera un elemento estabilizador de austenita aquel que hacen que la temperatura eutectoide disminuya, agrandando la región austenítica del diagrama de fases Fe-Fe₃C, tanto el Mn como el Ni realizan esta función (Raghavan, 1995). Los elementos formadores de carburo, como el W, el Mo y el Ti, elevan la temperatura eutectoide del diagrama de fases Fe-Fe₃C a valores más altos y reducen el campo de la fase austenítica (Dadé et al., 2019). Dichos elementos reciben el nombre de elementos estabilizadores de ferrita. En la figura 1.2 es mostrada la influencia de algunos elementos aleantes sobre la temperatura de transformación eutectoide. Aunque no están presentes el C, el Ni y el Cu también son elementos estabilizadores de austenita.

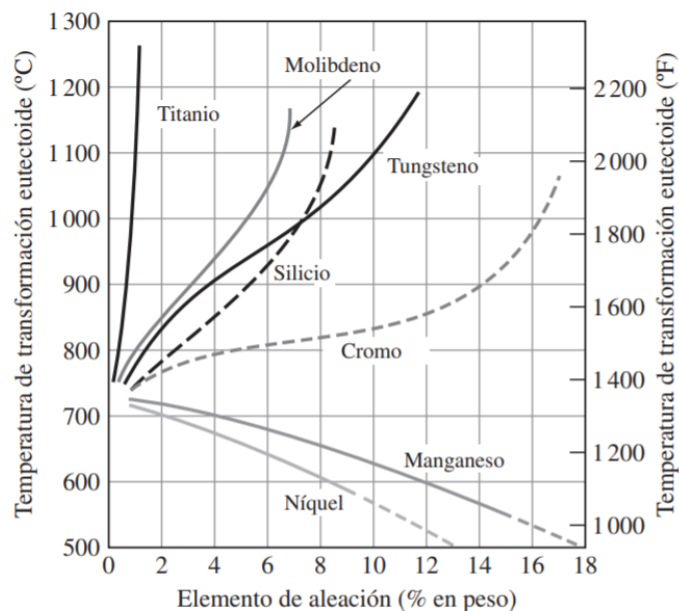


Figura 1.2. Influencia de elementos de aleación sobre la temperatura de transformación eutectoide (Smith et al., 2006)

Al comparar la influencia del Cr sobre la temperatura de transformación eutectoide como elemento estabilizador de ferrita con la influencia en la conductividad térmica de aceros presentada en la figura 1.3, (en aceros que también contienen níquel), es posible apreciar la influencia que ejercen la masa de elementos aleantes en la microestructura y a su vez su efecto sobre las propiedades del acero (Terada et al. (2002). El empleo de diagramas ternarios es práctico en estos casos, como se muestra en la figura 1.4.

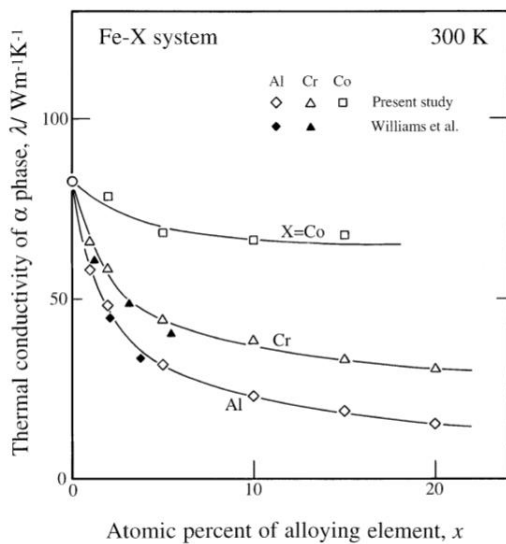


Figura 1.3. Variación de la conductividad térmica del acero respecto a concentración de elementos X. (Terada et al., 2002).

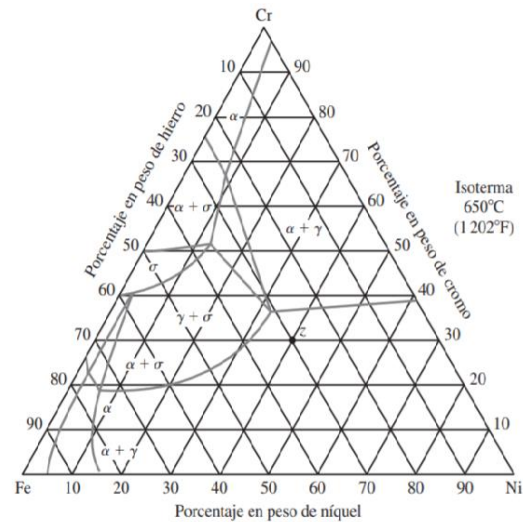


Figura 1.4. Diagrama de fases ternario de una sección isotérmica a 650°C para el sistema Fe-Ni-Cr (Boyer and Gall, 2006).

1.8 Modelación de propiedades del acero

El empleo del método experimental para determinar propiedades de materiales resulta costoso y complejo, esta problemática ha conducido numerosos científicos a trabajar 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 (Wang et al., 2021), como análisis de regresión lineal múltiple, que consiste en establecer la relación

que se produce entre una variable dependiente y un conjunto de variables independientes, a diferencia del simple, se aproxima más a situaciones de análisis real puesto que los fenómenos, por definición, son complejos y, en consecuencia, deben ser explicados en la medida de lo posible por la serie de variables que, directa e indirectamente, participan en su concreción (Rodríguez-Jaume and Mora Catalá, 2001). A partir de análisis estadísticos de datos obtenidos en experimentos previos se llega a modelos por distintas técnicas (Algarra, 2006, Peña, 2002).

El estudio de propiedades mecánicas del acero es amplio, destacan un grupo de trabajos dedicados a la predicción de propiedades mecánicas del acero. En las investigaciones de Xie et al. (2021) y Saoudi et al. (2020) se emplean redes neuronales artificiales (RNA) para modelar el límite elástico, la resistencia máxima a la tracción, elongación, la dureza, el coeficiente elongación y energía absorbida por impacto, se toman como datos de entrada para crear los modelos los valores del porcentaje en peso de los elementos de aleación. Narayana et al. (2020) desarrollaron un modelo empleando RNA para correlacionar la temperatura y las propiedades mecánicas del acero inoxidable austenítico 18Cr-12Ni-Mo. El modelo es usado para estimar las correlaciones de composición-propiedad y temperatura-propiedad con una precisión del 97% y 91% respectivamente.

Para el modelo obtenido por Reddy et al. (2009) para aceros de baja aleación se utilizaron como entrada la velocidad de enfriamiento y temperatura de revenido además de la composición química, se realizó mediante RNA y presenta baja dispersión respecto a valores experimentales. Con información de investigaciones previas sobre datos de microestructura y propiedades mecánicas de aceros con estructura de ferrita poligonal, ferrita acicular, bainita granular, ferrita bainítica y martensita, Jung et al. (2020) obvian la

composición del acero como entrada para su modelo y correlaciona la microestructura con las propiedades objeto de estudio, obteniendo errores porcentuales absolutos medios de 6,59% y 10,78% respectivamente.

Se usan datos experimentales obtenidos en pruebas mecánicas realizadas en muestras de diferentes espesores de acero con bajo contenido de carbono por Borisade et al. (2020), quienes empleando JavaScript logran obtener un modelo con bajo error medio y elevado coeficiente de correlación para predecir las propiedades mecánicas del acero con bajo contenido de carbono. Se toman como entrada de datos la composición química del metal de soldadura para predecir la microestructura en aceros de ultra alta resistencia por Turichin et al. (2018), tomando también como base la composición de la aleación realizan su investigación Piekarska and Goszczyńska-Króliszewska (2017) para predecir propiedades mecánicas. Ito et al. (2020), basándose en información microestructural, propiedades de tracción y condiciones de carga hacen predicciones de la curva tensión-deformación de aceros ferríticos estimando la resistencia a la fatiga.

1.8.1 Modelación de propiedades termofísicas del acero.

En cuanto a la predicción de propiedades termofísicas de los aceros se destaca el uso de las RNA por Thibault and Grandjean (1991) como herramienta útil para modelar y correlacionar problemas prácticos de transferencia de calor donde se plantea que pueden usarse adecuadamente. En la investigación de Peet et al. (2011) se obtiene 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 demuestra haciendo predicciones de resultados experimentales

previos que no fueron incluidos en el proceso que lleva a la creación del mismo. La influencia de las variables de entrada en el modelo se presenta en la figura 1.5.

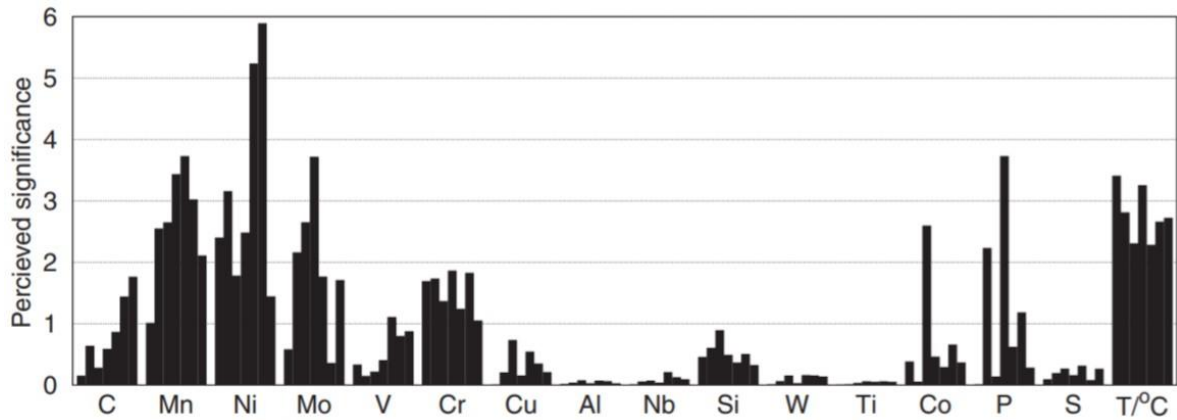


Figura 1.5. Influencia de las variables de entrada en el modelo obtenido por Peet et al.

(2011)

El coeficiente de transferencia de calor convectivo también es predicho mediante la aplicación de MEF a partir de la información crítica con respecto a la transformación de fase que ocurre en condiciones isotérmicas o no isotérmicas obtenida de diagramas de enfriamiento para bloques de acero forjado de gran tamaño (Bouissa et al., 2019).

El coeficiente de transferencia de calor dependiente de la temperatura, las curvas de enfriamiento, las curvas de velocidad de enfriamiento y la distorsión son predichas a partir de la modificación iterativa del método de capacidad calorífica concentrada y el método de transferencia de calor inverso en aceros AISI 304 (acero inoxidable) y AISI 1045 (acero estructural al carbono) por Sugianto et al. (2009) que realizan análisis mediante DEFORM-HT 2D. El coeficiente de transferencia de calor interfacial dependiente de la temperatura se predice por Gao et al. (2019) a partir de perfiles de temperatura experimentales que se introducen en el modelo computacional como las condiciones límite para predecir la distribución de temperatura interna del blanco, y luego se comparan con los perfiles de temperatura experimentales para acero al boro 22MnB5. Cinco algoritmos numéricos

diferentes son empleados y comparados, se concluye que el método de estimación no lineal de Beck es el más acertado.

Se realiza la estimación simultánea de la conductividad térmica dependiente de la temperatura y la capacidad calorífica específica de sólidos isotrópicos por Somasundharam and Reddy (2020) asumiendo que las propiedades térmicas desconocidas son una variación paramétrica con la temperatura y estos parámetros luego se estiman a partir de la solución del problema inverso para muestras de acero dulce y acero inoxidable, se simula la termodinámica y modelan diagramas de fase, se emplea algoritmo genético para la estimación de parámetros. Los valores obtenidos se encuentran dentro de un 10% de desviación de los datos de la literatura.

1.8.2 Principios de la inteligencia artificial.

Por su amplio empleo en la modelación de propiedades del acero y su empleo en esta investigación se dedica este apartado a las RNA, que 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 redes neuronales deben entrenarse, difiriendo de las computadoras convencionales que son programadas 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 en 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 and Saavedra, 2000).

La neurona constituye el elemento fundamental de una RNA, cuyo modelo se presenta en la figura 1.6. 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 and Mizraji, 2009).

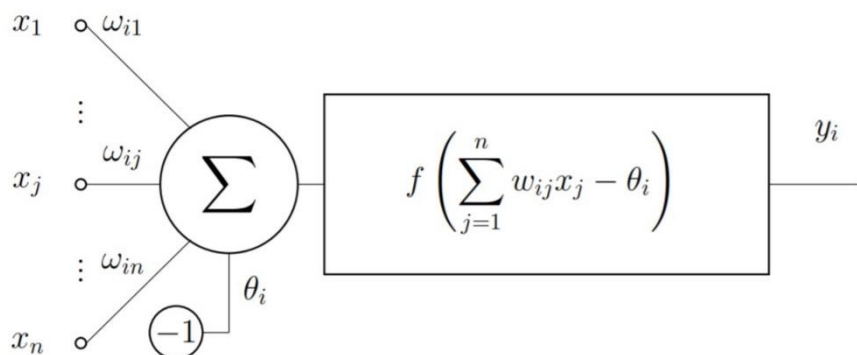


Figura 1.6. Modelo de neurona artificial (Vivas, 2014).

Teniéndose como modelo matemático más elemental el presentado en la ecuación (1.6).

$$y_i = f \sum_{j=1}^n (w_{ij} X_j - \theta_i) \quad (1.6)$$

El 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. Si los nodos fueran elementos lineales, entonces se podría usar una red de una sola capa los pesos apropiados en lugar de emplear dos o tres capas. La figura 1.7 muestra la estructura típica de una RNA perceptrón multicapa una red neuronal perceptrón multicapa típica estructura (López and Fernandez, 2008).

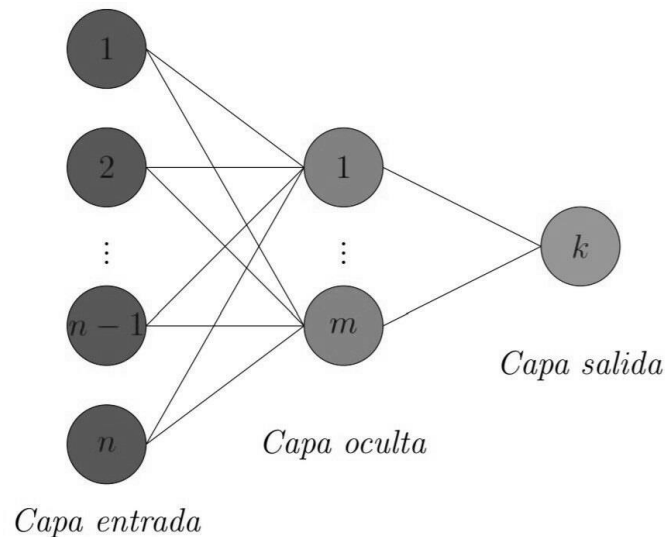


Figura 1.7. Estructura del perceptrón multicapa. Fuente:(Vivas, 2014).

La capa de entrada recibe información de fuentes externas y envía esta información a la red para su procesamiento. Pueden ser entradas sensoriales o de otros sistemas fuera del que está siendo modelado. La capa oculta recibe información de la capa de entrada y la procesa de forma oculta. No tiene conexiones directas con el exterior. Todas las conexiones de la capa oculta son para otras capas dentro del sistema. 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).

1.9 Método flash laser.

El método flash laser (MFL) fue desarrollado por Parker et al. (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 según la relación mostrada en la Ecuación (1.7) (Lunev et al., 2020).

$$\alpha = \lambda(C_p \rho)^{-1} \quad (1.7)$$

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

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 a una de sus caras suministrando calor, registrando el aumento de temperatura en la cara opuesta (Carr, 2019).

En la figura 1.8 se aprecia el principio de funcionamiento del MFL.

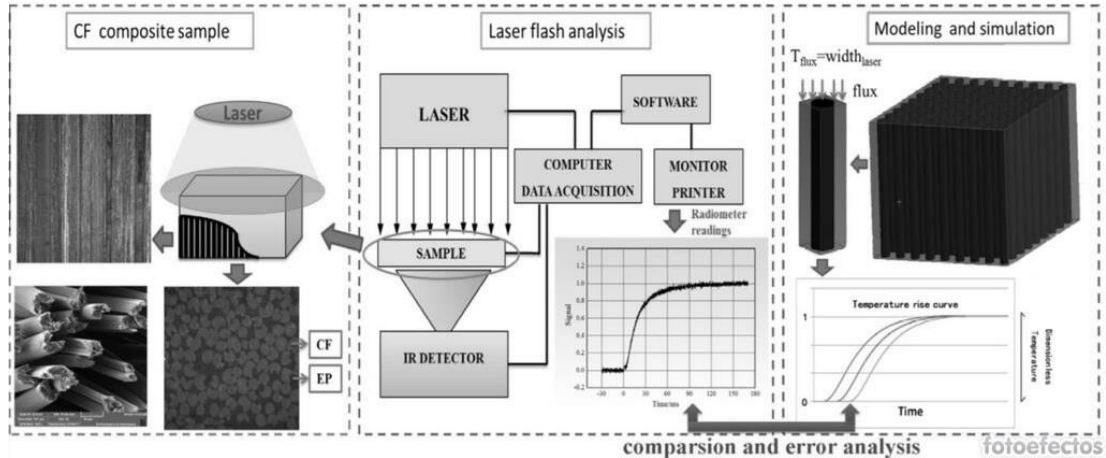


Figura 1.8. Principio de funcionamiento del MFL. Fuente: (Hu et al., 2015)

1.10 Conclusiones parciales del capítulo

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

1. En el rango de 0-800°C los aceros pueden experimentar tres reacciones invariantes, hipoeutectoide, eutectoide e hipereutectoide. Las propiedades del acero dependen de los micro constituyentes, y la proporción de estos varía de acuerdo a la posición de la línea eutectoide.
2. El porcentaje másico de los elementos de aleación influye en la microestructura, determinados elementos son estabilizadores de austenita, hacen que disminuya la temperatura eutectoide, aumentando la zona austenítica, en caso contrario se consideran elementos estabilizadores de ferrita.
3. Para la predicción de propiedades termo físicas del acero se han empleado métodos empíricos, RNA y MEF, se registra en la bibliografía un grupo importante de investigaciones, pero no se ha obtenido un modelo para un grupo amplio de aceros, los autores por regla general se centran en modelar una propiedad para un grupo muy específico de aceros o solamente para uno.

CAPÍTULO 2 MATERIALES Y MÉTODOS

En este capítulo se detalla la data disponible para realizar la modelación matemática y se presentan las normas por las que se rigen las mediciones. Se definen los límites del modelo, dígase marcaciones de acero y valores extremos de composición másica porcentual de elementos aleantes. Se detalla el procedimiento para aplicar el método de ajuste progresivo de funciones. Se describe como se emplea la inteligencia artificial para modelar las propiedades objetivo. Para la creación de una aplicación se emplea el *software* Matlab R2019a, las funciones de cada objeto en dicha aplicación son explicadas en el presente capítulo.

2.1. Datos experimentales disponibles.

Desde el Departamento de Ingeniería Mecánica de la Escuela de Ingeniería y Ciencias Aplicadas ubicada en Bakú, Azerbaiyán se reciben los datos de mediciones experimentales realizadas a 32 marcaciones de aceros normados según AISI-SAE. La carta aval de la ejecución de estos experimentos es mostrada en el Anexo 2. Las marcaciones en cuestión son mencionadas en la tabla 2.1.

Tabla 2.1. Marcaciones de aceros AISI-SAE empleados en los experimentos.

1008	1030	1045	1078	1095	1145	1345	1524	2330	2515
301	302	304	310	316	347	4028	405	410	4130
4140	420	430	4320	4626	5132	5140	6150	8115	8617
8650	8822								

Para cada propiedad se realizan mediciones en el rango de 0-800°C, específicamente a 0, 100, 200, 300, 400, 600 y 800°C, para un total de siete mediciones por réplica. Como se puede apreciar ocurren saltos en las mediciones en los intervalos 400-600°C y 600-800°C, esto sucede por las diferencias microestructurales que existen entre una marcación de acero

y otra en esta zona del diagrama Fe-C, provocadas por la influencia de los elementos aleantes, sean potenciadores de ferrita o austenita, provocando desplazamientos en la temperatura eutectoide del material y como se pretende obtener un modelo funcional para toda la gama de aceros disponible de la data el hecho de introducir las mediciones en estos rangos traería consigo una mayor dispersión de los valores entregados por el modelo respecto a los valores experimentales. Para cada marcación de acero se realizan 93 réplicas del experimento, variando la composición química de las probetas dentro los márgenes mostrados en la tabla 2.2, se una muestra de estos valores en la tabla y el resto se pueden encontrar en el Anexo 3.

Tabla 2.2 Valores límite de composición para una muestra de los aceros empleados.

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
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
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

Se cuenta con 20 832 mediciones experimentales para cada propiedad objeto de estudio. Para cada probeta se detalla la composición másica porcentual (w%) de los elementos carbono, manganeso, fósforo, azufre, silicio, níquel, cromo, molibdeno y vanadio, elementos que serán utilizados como entrada de los modelos propuestos, así como la temperatura de trabajo.

2.1.1 Mediciones experimentales de conductividad térmica y calor específico.

Las normas empleadas para las mediciones se encuentran reflejadas en el Anexo 2. La precisión de los experimentos para la conductividad térmica son de $\pm 4\%$ y la repetitividad del experimento de $\pm 3\%$, son realizadas las mediciones con un equipo para análisis flash laser marca LINSEIS modelo LZT-Meter. En el caso del calor específico la precisión es de $\pm 5\%$ y la repetitividad del experimento es de $\pm 3\%$, las mediciones son realizadas con un equipo para análisis flash laser marca LINSEIS modelo LFA 1000. Para determinar ambas propiedades se utilizan muestras de 3x3mm, 10x10mm y 20x20mm.

2.2 Método de ajuste progresivo de funciones

Primeramente, se realiza la modelación por el método de ajuste progresivo de funciones (APF). Este método permite la convergencia de una correlación base, a partir de correcciones realizadas por medio de funciones lineales o polinomios (Bronshtein and Semendiaev, 1973). Se aplica APF con distintas configuraciones de datos. Primeramente, se emplearon todos los datos experimentales disponibles, presentando el modelo un error absoluto experimental mayor al 20% en aceros con $w\%$ de C superiores a 0,72% (AISI-SAE 1078 y 1095) y en los aceros 310, 405, 410, 420, estos contienen $w\%$ de Cr entre 14 y 24 y de Ni de 19 en el caso del 310. Posteriormente se prueba el método excluyendo los valores que presentaron errores superiores al 20% en el primer caso, pero en el rango de temperaturas de 600-800°C no se obtienen buenos resultados. Luego se intenta filtrando los valores que difieren en $\pm 15\%$ respecto al valor medio de cada grupo de réplicas para una marcación de acero y se mantienen errores más elevados a los esperados. Finalmente se desarrolla el método para los valores medios del grupo de réplicas de cada acero, en este caso se obtienen los mejores resultados. Se obtienen los valores promedio de las

mediciones para cada acero e intervalo de temperatura mediante la ecuación (2.1) y una muestra de ellos es presentada en la tabla 2.3, los valores correspondientes de composición química son mostrados en la tabla 2.4.

$$\bar{X}_{(T)} = \frac{1}{n} \sum X_{(T)} \quad (2.1)$$

Donde: $\bar{X}_{(T)}$ es el promedio de la propiedad o composición para cada acero estudiado a la temperatura T . $\sum X_{(T)}$ es la sumatoria de todos los valores disponibles de cada propiedad o composición en cada acero estudiado a la temperatura T . n es el número de muestras disponibles en cada acero estudiado a la temperatura T .

Tabla 2.3 Muestra de valores medios de conductividad térmica medidos, $W/(m \cdot ^\circ C)$

AISI	0°C	100°C	200°C	300°C	400°C	600°C	800°C
1008	59,8	57,8	53	49,5	45,6	36,8	27,8
1030	52,9	51,1	49	46	42,8	35,6	26,1
1045	51,9	50,7	48,2	45,6	41,8	33,9	24,7
301	16,4	17,8	19,1	20,5	21,8	24,4	26,5
5140	47,9	44,8	43,5	41,8	37,7	31,4	26,2

Tabla 2.4. Muestra de valores medios de composición química (w %).

AISI	C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	V
1008	0,08	0,4	0,03	0,04	0	0	0	0	0
1030	0,31	0,7	0,03	0,04	0	0	0	0	0
1045	0,47	0,75	0,03	0,04	0	0	0	0	0
301	0,13	1,89	0,03	0,02	0,64	7	17,2	0	0
5140	0,41	0,78	0,03	0,03	0,28	0	0,8	0	0

Para aplicar el método APF primeramente se definen los factores R_1 y R_2 , se calculan por las ecuaciones (2.2) y (2.3) respectivamente. Estos factores responden a la influencia de los elementos de aleación sobre las propiedades de los aceros estudiados determinada por los

cambios que provocan en la microestructura del material a una determinada temperatura, luego se avalúan los resultados del modelo con diferentes combinaciones. Los valores correspondientes a la composición se introducen en $w\%$.

$$R_1 = \sqrt{C + Cr} \quad (2.2)$$

$$R_2 = \sqrt[4]{Mn + S + P + Si + Ni + Mo + V} \quad (2.3)$$

Todos los desarrollos matemáticos, la obtención de gráficos y la obtención de valores con el modelo se implementan en Matlab R2018a, el Anexo 3 muestra código generado para modelación de la conductividad térmica y el calor específico, siendo similares, pues solamente cambian las variables de entrada.

2.3 APF aplicado a la conductividad térmica.

Primeramente es aplicado el método de mínimos cuadrados para cada marcación acero para correlacionar la temperatura de la medición y el valor medido de conductividad térmica, es usada una función lineal de la forma $\bar{K}_{(T)} = bT + c$. Son resumidos los parámetros b y c para cada correlación y su respectivo coeficiente de determinación R^2 en la tabla 2.5, así como los respectivos valores de composición R_1 .

Para establecer la función base en la predicción de la conductividad térmica, son correlacionados de forma individual los parámetros b y c con R_1 , obteniendo de esta forma una primera aproximación para describir la dependencia entre la temperatura y la conductividad térmica, para cualquiera de los aceros AISI evaluados. Las correlaciones obtenidas son mostradas en las figuras 2.1 y 2.2.

Tabla 2.5. Correlación de valores para el primer ajuste.

AISI	R_1	b	c	R^2	AISI	R_1	b	c	R^2
1008	0,283	-0,041	61,166	0,99	4 028	0,529	-0,028	50,529	0,99
1030	0,557	-0,034	54,845	0,98	405	3,655	0,012	26,811	0,92

1045	0,686	-0,035	54,292	0,98	410	3,582	0,012	27,201	0,91
1078	0,883	-0,031	50,185	0,98	4 130	1,136	-0,021	45,811	0,99
1095	0,99	-0,029	48,814	0,99	4 140	1,179	-0,021	45,962	0,99
1145	0,678	-0,033	52,937	0,99	420	3,651	0,013	27,384	0,93
1345	0,64	-0,033	51,017	0,99	430	4,159	0,016	23,502	0,98
1524	0,469	-0,033	53,45	0,99	4320	0,849	-0,021	45,668	0,99
2330	0,574	-0,026	47,593	0,99	4626	0,52	-0,027	50,646	0,95
2515	0,387	-0,027	46,931	0,99	5132	1,109	-0,029	49,68	0,99
301	4,163	0,013	16,559	0,99	5140	1,1	-0,027	48,458	0,99
302	4,281	0,013	16,286	0,99	6150	1,221	-0,019	46,763	0,96
304	4,39	0,013	16,073	0,99	8115	0,762	-0,019	44,1	1
310	4,922	0,01	14,947	0,99	8617	0,837	-0,019	43,776	1
316	4,132	0,009	17,128	0,99	8650	1,015	-0,018	43,093	1
347	4,274	0,01	16,004	0,99	8822	0,866	-0,019	43,425	1

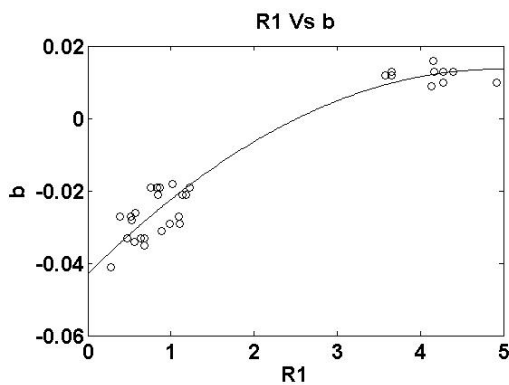


Figura 2.1. Correlación entre el parámetro b y el factor R_1 .

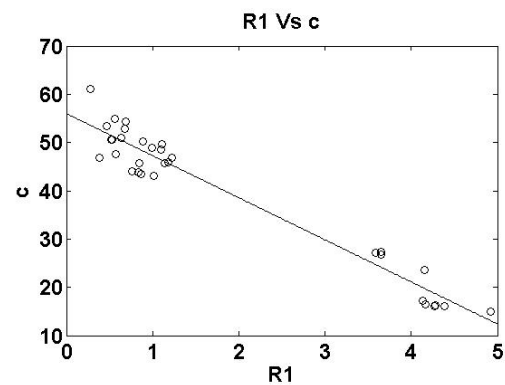


Figura 2.2. Correlación entre el parámetro c y el factor R_1 .

A partir de las figuras 2.1 y 2.2 se definen las ecuaciones (2.4) y (2.5), las cuales describen la trayectoria de la línea de tendencia que mejor ajusta a los gráficos de dispersión.

$$Y_1 = -0,002(R_1)^2 + 0,023(R_1) - 0,043 \quad (2.4)$$

$$Y_2 = -8,705(R_1)^2 + 55,93 \quad (2.5)$$

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

Para la primera aproximación o función base del APF se calcula como se muestra en la ecuación (2.6), el error absoluto experimental se calcula según la ecuación (2.7)

$$\bar{K}_{(1)} = Y_1 \cdot T + Y_2 \quad (2.6)$$

Donde: $\bar{K}_{(1)}$ es el valor de conductividad térmica calculado por la primera aproximación de APF. T es la temperatura, en °C.

$$Error = \left| \frac{V_E - V_M}{V_E} \cdot 100\% \right| \quad (2.7)$$

Donde: V_E es el valor experimental y V_M es el valor obtenido con el modelo.

Para esta primera aproximación el valor de error absoluto experimental obtenido es de 8,23%, por lo que se procede a realizar un segundo paso de ajuste, para esto se procede a calcular el cociente presentado en la ecuación (2.8).

$$\bar{K}_{(2)} = \bar{K}_{(T)} / \bar{K}_{(1)} \quad (2.8)$$

Donde $\bar{K}_{(T)}$ es el valor de conductividad térmica experimental.

Una muestra de los valores del cociente $\bar{K}_{(2)}$ se presenta en la tabla 2.6.

Tabla 2.6. Muestra de valores del cociente $\bar{K}_{(2)}$.

AISI	0°C	100°C	200°C	300°C	400°C	600°C	800°C
1008	1,118	1,161	1,150	1,167	1,178	1,176	1,163
1030	1,035	1,064	1,091	1,100	1,106	1,095	0,992
1045	1,038	1,074	1,086	1,096	1,078	1,021	0,895
301	0,834	0,829	0,821	0,818	0,811	0,801	0,778
5140	1,033	1,010	1,027	1,035	0,982	0,913	0,862

Nuevamente es aplicado el método de mínimos cuadrados para correlacionar los valores de temperatura con valores medidos de conductividad térmica para cada acero, pero esta vez

de la forma $\bar{k}_{(T)} = dT^2 + eT + f$. En la tabla 2.7 son presentados los parámetros d , e y f , su correlación, así como los factores R_2 calculados mediante la ecuación (2.3).

Tabla 2.7. Correlación de valores para el segundo paso de ajuste.

AISI	R_2	d	e	f	R^2	AISI	R_2	d	e	f	R^2
1008	0,82	-0,002	2,073	11 252	0,83	4028	1,08	0,001	0,456	9 840	0,92
1030	0,93	-0,005	4,370	10 292	0,96	405	1,14	-0,005	3,112	10 604	0,82
1045	0,95	-0,007	3,943	10 391	0,99	410	1,23	-0,005	3,184	10 469	0,81
1078	0,84	-0,005	2,063	10 077	0,92	4130	1,01	-0,001	0,277	9 865	0,88
1095	0,82	-0,003	0,237	10 161	0,95	4140	1,09	-0,001	0,387	9 979	0,80
1145	0,98	-0,002	0,839	10 425	0,86	420	1,15	-0,005	2,792	10 859	0,89
1345	1,19	-0,002	0,515	10 019	0,77	430	1,24	-0,003	1,137	11 491	0,95
1524	1,11	-0,002	2,587	10 068	0,85	4320	1,30	0	1,136	9 336	0,96
2330	1,45	0	1	9 264	0,85	4626	1,16	-0,005	5,165	9 413	0,98
2515	1,55	0,001	0,073	8 958	0,95	5132	1	-0,004	0,369	10 534	0,98
301	1,75	0	-0,374	8 326	0,99	5140	1,02	-0,003	0,179	10 293	0,93
302	1,74	0	-0,706	8 622	0,98	6150	1,06	-0,004	3,111	9 978	0,91
304	1,847	0	-1,291	8 958	0,99	8115	1,105	0,001	0,794	8 952	0,99
310	2,203	0,003	-6,918	11 131	0,99	8617	1,168	0,001	0,548	9 008	0,99
316	2,025	0	-1,939	8 462	0,98	8650	1,18	0	0,293	9 152	0,99
347	1,908	0	-1,615	8 396	0,98	8822	1,199	0,001	0,656	8 975	0,99

Se procede a correlacionar los valores de los parámetros d , e y f con el factor R_2 respectivamente para definir la primera corrección. Las correlaciones obtenidas son mostradas en las figuras 2.3, 2.4 y 2.5, partiendo de la ecuación que describe la tendencia en los gráficos de dispersión mostrados se escriben las ecuaciones (2.9), (2.10) y (2.11).

$$Y_3 = -0,002(R_2)^2 + 0,009(R_2) - 0,01 \quad (2.9)$$

$$Y_4 = -5,764(R_2)^2 + 12,487(R_2) - 4,962 \quad (2.10)$$

$$Y_5 = 2453(R_2)^2 - 8313(R_2) + 16072 \quad (2.11)$$

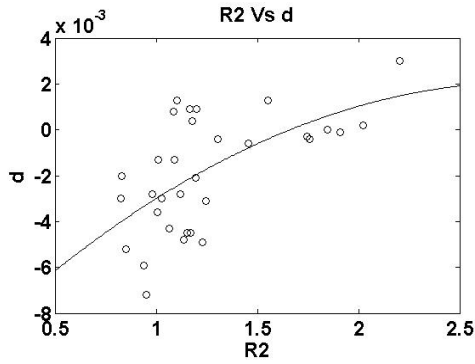


Figura 2.3. Correlación del parámetro d con

el factor R_2 .

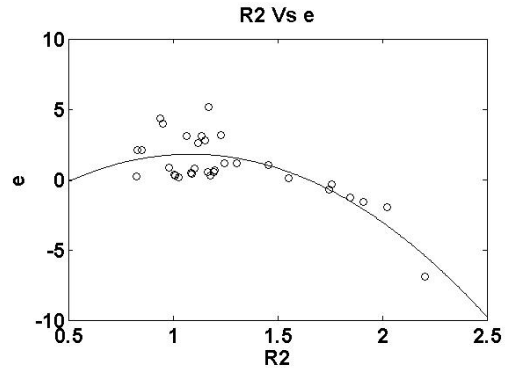


Figura 2.4. Correlación del parámetro e con el

factor R_2 .

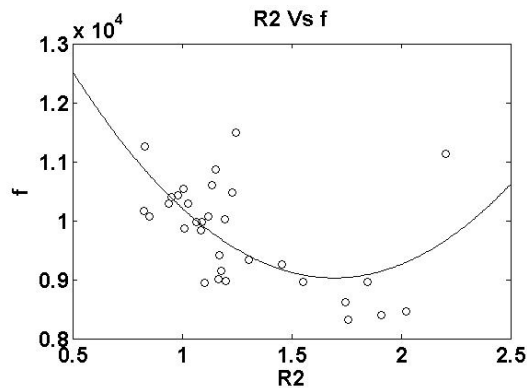


Figura 2.5. Correlación del parámetro f con el factor R_2 .

Por último se presenta la ecuación (2.12), con ella se estiman los valores de conductividad térmica en el rango de 0-800°C para las marcaciones de acero estudiadas.

$$\bar{K}_{(3)} = [Y_3 \cdot T^2 + Y_4 \cdot T + Y_5] \bar{K}_{(2)} \quad (2.12)$$

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

2.4 APF para calor específico.

La aplicación de APF para el calor específico es similar al procedimiento realizado en el epígrafe 2.3 para la conductividad térmica, por lo que se obviarán análisis ya realizados.

Los factores R_1 y R_2 se calculan por las ecuaciones (2.2) y (2.3) respectivamente.

En la tabla 2.8 son resumidos los parámetros b y c para cada correlación y su respectivo coeficiente de determinación R^2 , así como los respectivos valores de composición R_1 .

Tabla 2.8. Correlación de valores para el primer ajuste.

AISI	R_1	b	c	R^2	AISI	R_1	b	c	R^2
1008	0,283	0,292	472,59	0,95	4 028	0,529	0,301	464,06	0,96
1030	0,557	0,369	456,19	0,88	405	3,655	0,242	432,83	0,93
1045	0,686	0,381	444,22	0,81	410	3,582	0,245	438,42	0,93
1078	0,883	0,469	442,84	0,77	4 130	1,136	0,363	444,82	0,87
1095	0,99	0,289	443,39	0,96	4 140	1,179	0,344	419,53	0,87
1145	0,678	0,353	427,07	0,87	420	3,651	0,241	432,02	0,93
1345	0,64	0,368	460,96	0,87	430	4,159	0,242	432,83	0,93
1524	0,469	0,377	454,63	0,87	4320	0,849	0,353	431,72	0,87
2330	0,574	0,217	436,80	0,98	4626	0,52	0,208	334,13	0,94
2515	0,387	0,216	459,34	0,98	5132	1,109	0,205	483,42	0,98
301	4,163	0,277	466,63	0,94	5140	1,1	0,243	436,40	0,96
302	4,281	0,272	463,38	0,93	6150	1,221	0,28	451,20	0,94
304	4,39	0,267	457,18	0,94	8115	0,762	0,273	442,44	0,94
310	4,922	0,264	450,98	0,93	8617	0,837	0,281	458,74	0,94
316	4,132	0,256	436,84	0,94	8650	1,015	0,272	448,70	0,94
347	4,274	0,254	456,98	0,93	8822	0,866	0,29	477,42	0,94

A partir de las correlaciones de los parámetros b y c con R_1 se escriben las ecuaciones (2.13) y (2.14).

$$Y_{ce1} = 0,001(R_1)^2 - 0,02(R_1) + 0,321 \quad (2.13)$$

$$Y_{ce2} = 0,947(R_1) + 443,854 \quad (2.14)$$

Donde: Y_{ce1} corresponde a la línea de tendencia de R_1 Vs b y Y_{ce2} corresponde a la línea de tendencia de R_1 Vs c

La primera aproximación o función base el APF se calcula como se muestra en la ecuación (2.15), el error absoluto experimental se calcula según la ecuación (2.7)

$$\overline{K}_{ce(1)} = Y_{ce1} \cdot T + Y_{ce2} \quad (2.15)$$

Donde: $\bar{K}_{ce(1)}$ es el valor de calor específico calculado por la primera aproximación de APF. T es la temperatura, en °C.

Para esta primera aproximación el valor de error absoluto experimental obtenido es de 5,21%, por lo que se procede a realizar un segundo paso de ajuste, para esto se procede a calcular el cociente presentado en la ecuación (2.16).

$$\bar{K}_{ce(2)} = \bar{K}_{ce(T)} / \bar{K}_{ce(1)} \quad (2.16)$$

Donde: $\bar{K}_{ce(T)}$ es el valor de calor específico experimental.

Una muestra de los valores del cociente $\bar{K}_{ce(2)}$ se presenta en la tabla 2.9.

Tabla 2.9. Muestra de valores del cociente $\bar{K}_{ce(2)}$.

AISI	0°C	100°C	200°C	300°C	400°C	600°C	800°C
1008	1,094	1,085	1,043	1,006	1,005	0,995	1,054
1030	1,096	1,079	1,033	1,010	1,008	0,995	1,174
1045	1,087	1,062	1,018	0,989	0,983	0,957	1,203
301	1,088	1,069	1,030	1,009	1,026	1,020	1,102
5140	1,014	0,988	0,947	0,922	0,933	0,914	0,949

Se procede a realizar un segundo paso de ajuste. En la tabla 2.10 son presentados los parámetros d , e y f , su correlación, así como los factores R_2 calculados mediante la ecuación (2.3).

A partir de la correlación de los valores de los parámetros d , e y f con el factor R_2 respectivamente se define la primera corrección. Se obtienen las ecuaciones (2.17), (2.18) y (2.19).

$$Y_{ce3} = 0,005(R_2)^2 - 0,017(R_2) + 0,019 \quad (2.17)$$

$$Y_{ce4} = -2,405(R_2)^2 + 8,64(R_2) - 11,571 \quad (2.18)$$

$$Y_{ce5} = 1153(R_2)^2 - 3543(R_2) + 13068 \quad (2.19)$$

La combinación de las ecuaciones (2.16) a la (2.19) permite estimar la variación del calor específico y su dependencia con la temperatura y composición química.

$$\bar{K}_{ce(3)} = \left[Y_{ce3} \cdot T^2 + Y_{ce4} \cdot T + Y_{ce5} \right] \bar{K}_{ce(2)} \quad (2.20)$$

Tabla 2.10. Correlación de valores para el segundo paso de ajuste.

AISI	R_2	d	e	f	R^2	AISI	R_2	d	e	f	R^2
1008	0,82	0,00	-4,57	11 084	0,91	4028	1,08	0,01	-4,33	10 166	0,92
1030	0,93	0,01	-6,49	11 180	0,85	405	1,14	0,01	-4,45	10 303	0,82
1045	0,95	0,01	-8,07	11 158	0,81	410	1,23	0,01	-6,22	10 910	0,81
1078	0,84	0,01	-9,30	11 509	0,78	4130	1,01	0,01	-5,84	10 29	0,88
1095	0,82	0,00	-2,90	10 288	0,62	4140	1,09	0,01	-4,29	10 143	0,80
1145	0,98	0,01	-6,23	10 507	0,84	420	1,15	0,01	-4,21	10 157	0,89
1345	1,19	0,01	-6,49	11 277	0,83	430	1,24	0,01	-6,10	10 591	0,95
1524	1,11	0,01	-6,73	11 195	0,84	4320	1,30	0,00	-3,59	7888,5	0,96
2330	1,45	0,00	-2,06	9 852	0,85	4626	1,16	0,00	-3,12	10 930	0,98
2515	1,55	0,00	-2,54	10 370	0,89	5132	1	0,00	-3,97	10 157	0,98
301	1,75	0,01	-4,15	10 944	0,92	5140	1,02	0,01	-4,59	10 636	0,93
302	1,74	0,01	-4,20	10 871	0,92	6150	1,06	0,01	-4,71	10 439	0,91
304	1,84	0,01	-4,08	10 715	0,93	8115	1,10	0,01	-4,82	10 813	0,99
310	2,20	0,01	-3,94	10 563	0,93	8617	1,16	0,01	-4,80	10 582	0,99
316	2,02	0,00	-3,96	10 247	0,93	8650	1,18	0,01	-5,14	11 263	0,99
347	1,90	0,01	-4,44	10 718	0,93	8822	1,19	0,01	-4,33	10 166	0,99

2.5 Aplicación de inteligencia artificial en el caso de estudio.

Para la obtención del modelo empleando redes neuronales se trabaja con el *software* Matlab R2019a. Primeramente se organiza la data, resultando en 20 832 experimentos disponibles para el trabajo de obtención del modelo. Luego se divide el total de datos en tres subconjuntos, dígame, entrenamiento, validación y prueba. A continuación, se ejecuta un ciclo que genera en cada iteración un número aleatorio de neuronas para la capa oculta

entre 1 y 50 y se entrena con el primer subconjunto de datos. Al finalizar el entrenamiento, se evalúa el modelo con el segundo subconjunto de datos y si los resultados obtenidos superan a los de todas las iteraciones previas se actualiza el mejor modelo global con el modelo de la iteración en curso. Este proceso se repite hasta cumplir con un criterio de parada previamente definido que consiste en que al calcular el coeficiente de determinación este superare 0,95 o se realicen 100 iteraciones del ciclo. Al finalizar el ciclo, el mejor modelo global se evalúa con el tercer subconjunto de datos para determinar su capacidad de predicción. Se emplean ocho funciones de entrenamiento disponibles en Matlab, siendo la que mejor resultados entrega la de retropropagación Levenberg-Marquardt, algoritmo ampliamente empleado para resolver problemas de mínimos cuadrados no lineales (Sousa, 2011).

2.6 Elaboración de *software* para emplear los métodos obtenidos.

Para el empleo de los modelos obtenidos en la predicción de conductividad térmica y calor específico del acero en cualquier metodología de cálculo donde pueda interesar resultaría poco práctico entregar un complejo código que debe ser ejecutado sobre un *software* que solicita recursos avanzados en una computadora de altas prestaciones, por lo que se procede a confeccionar una aplicación que resulta en un archivo ejecutable y fácil de usar para darle valor de uso a esta investigación.

El *software* Matlab en su versión R2018a brinda la opción de diseñar aplicaciones partiendo de una interfaz gráfica sencilla e intuitiva empleando el módulo *AppDesigner*. Para compilar el código se emplea este *software* y se crean las versiones Matlab App, dirigida a usuarios de Matlab, la versión Web App, solamente utilizable en la red y la versión *Standalone Desktop App*, ejecutable que se puede instalar en cualquier ordenador

con sistema operativo Windows 7 de 64 bits o superior. La aplicación se nombra *SteelTFP 1.0*, consta de una única ventana, siendo mostrada en la figura 2.6.

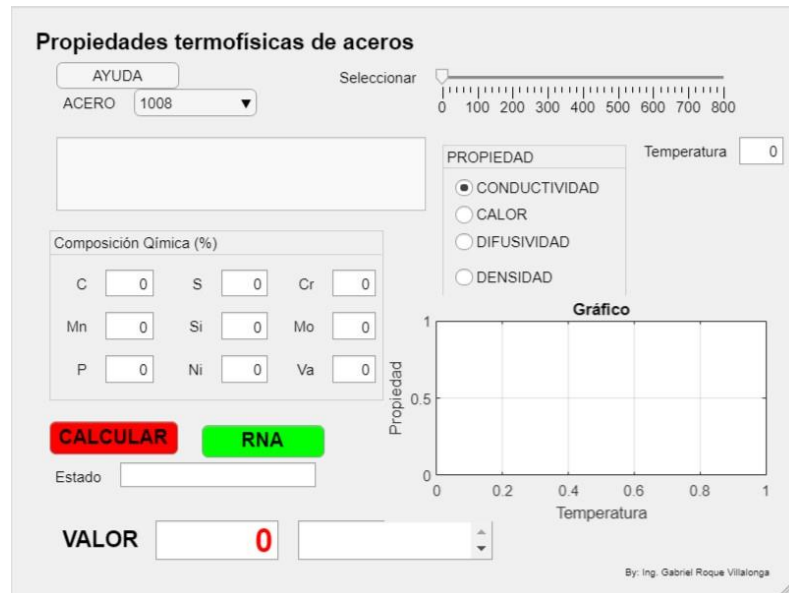


Figura 2.6. Pantalla de *SteelTFP 1.0*

A continuación, se detallan las funciones de cada elemento de la aplicación:

- Botón “AYUDA”: Al hacer clic en él el usuario observa en un cuadro de texto breves instrucciones de uso de la aplicación.
- Lista “ACEROS”: En esta lista desplegable el usuario debe seleccionar la marcación de acero objetivo. Automáticamente un cuadro de texto muestra en pantalla los límites de w% de cada elemento que conforma la marcación seleccionada correspondiéndose con el modelo.
- Seleccionador deslizable de temperatura (*slider*): El usuario puede seleccionar la temperatura de trabajo del material en el rango de 0-800°C, así como puede escribirla en el cuadro de entrada de datos inferior.
- Cuadro “Composición Química (w%)”: Se introducirán los valores de composición química en w% del acero estudiado, si se exceden los límites se mostrará una alarma y

no se podrá introducir el valor erróneo. Por defecto los valores que se muestran son los valores medios de la marcación seleccionada.

- Seleccionador “PROPIEDAD”: Deberá seleccionarse la propiedad que se desea predecir, al ser un *software* en construcción se muestran la densidad y la difusividad para en un futuro próximo incorporar al cálculo.
- Botones “CALCULAR” y “RNA”: Al hacer clic en cualquiera de ellos se calcula la propiedad seleccionada previamente para los valores de temperatura y composición química.
- Cuadro de texto “VALOR”: Muestra el resultado que entrega el modelo, inmediatamente a la derecha se muestra la unidad de medida en que se expresa la propiedad en cuestión.
- “GRÁFICO”: En este espacio el usuario podrá apreciar de manera gráfica cómo se comporta en el caso de estudio específico la propiedad en todo el rango de temperaturas estudiado.

2.7 Conclusiones parciales del capítulo

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

1. El método APF es empleado para modelar la conductividad térmica y el calor específico, en ambos casos se obtiene un resultado óptimo en la segunda iteración, este modelo constituye una novedad científica.
2. Se comprueba cual resulta la mejor función de entrenamiento para entrenar una RNA, orientada a los objetivos de esta investigación, resultando en ser la de retropropagación

Levenberg-Marquardt. Para entrenar la red se cuenta con un total de 20 832 valores de entrada y salida.

3. Se emplea el diseñador de aplicaciones del *software* Matlab R2019a para elaborar una aplicación que permite el fácil empleo de los modelos obtenidos. Los detalles de cada objeto son explicados.

CAPÍTULO 3 ANÁLISIS DE LOS RESULTADOS

En este capítulo se presentan los valores del coeficiente de determinación y de error absoluto experimental para el método APF y para la RNA. Se presentan los gráficos de predicciones Vs mediciones en todos los casos. Se realiza la comparación de los valores obtenidos mediante los modelos con valores normados registrados en la bibliografía. Se comparan los modelos obtenidos por ambos métodos. Se describe cómo debe emplear un usuario la aplicación creada.

3.1 Resultados obtenidos con APF

Se realiza la evaluación en el modelo obtenido por el método APF para las 32 marcaciones de acero estudiadas, introduciendo la composición química en w% y la temperatura de trabajo en el rango de las siete mediciones mencionadas anteriormente.

3.1.1 APF para conductividad térmica

En la figura 3.1 se representan los valores medidos en función de los valores predichos y en la figura 3.2 los residuales para este caso. El coeficiente de determinación (R^2) que se obtiene es de 0,96 y el error absoluto experimental es de 5,85%.

3.1.2 APF para calor específico

Los valores de mediciones en función de las predicciones para el caso del calor específico son mostrados en la figura 3.3 y los residuales de este caso se presentan en la figura 3.4. El R^2 obtenido es de 0,81 y el error absoluto experimental de 4,4%.

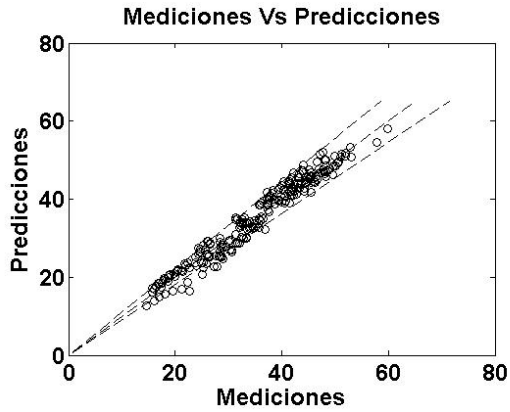


Figura 3.1 Valores predichos en función de las mediciones de conductividad térmica.

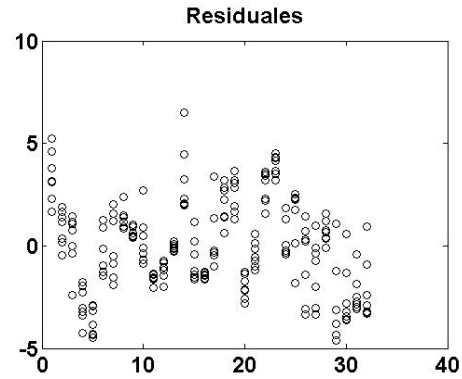


Figura 3.2. Gráfico de residuales para la conductividad térmica.

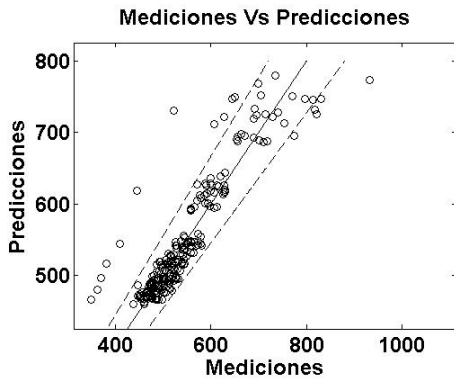


Figura 3.3. Valores predichos en función de las mediciones de calor específico.

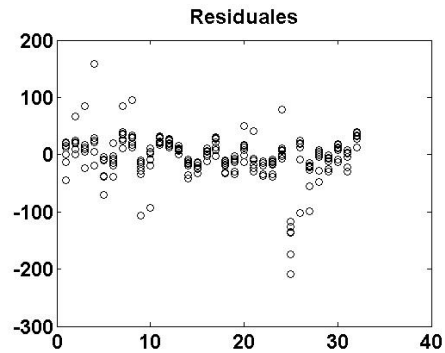


Figura 3.4. Gráfico de residuales para el calor específico.

3.2 Comparación del modelo APF con valores normados

En la bibliografía consultada y disponible (Steels, 2014) existen datos de conductividad térmica y calor específico de numerosos aceros, pero entre el grupo de aceros no tratados térmicamente y en el rango de temperaturas estudiado en el presente trabajo solamente coinciden los aceros 1008 y 5132, sus valores medios de composición química son presentados en la tabla 3.1. La composición química será introducida en el modelo para comparar los resultados con los valores presentados en la bibliografía. Para introducir al modelo se emplearán los valores medios, en correspondencia con los valores empleados en la confección del mismo.

Tabla 3.1 Composición de aceros estudiados. Fuente:(Steels, 2014)

AISI- SAE	Composición química (w%)								
	C	Mn	P	S	Si	Ni	Cr	Mo	V
1008	0,8 Max	0,3-0,5	0,04	0,05	0	0	0	0	0
5132	0,30- 0,35	0,60- 0,80	0,035	0,040	0,15- 0,35	0	0,75- 1,00	0	0

3.2.1 Comparación para conductividad térmica

Los valores normados de conductividad térmica registrados en la bibliografía para los aceros AISI 1008 y 5132 se muestran en la tabla 3.2. Los valores obtenidos por el modelo propuesto se presentan en la tabla 3.3, a partir de estos se determina el error absoluto experimental que es de 6,9% y el R^2 que es 0,93. En la figura 3.4 se presentan los valores normados en función de los valores que ofrece el modelo propuesto y en la figura 3.5 se muestra los residuales de dicha estimación. Los valores de mayor error se presentan para el acero 5132 en el rango de temperaturas superior a 600°C.

Tabla 3.2 Valores de conductividad térmica normados por AISI-SAE, (Steels, 2014)

AISI- SAE	Conductividad térmica W/(m · K) medido en °C						
	0	100	200	300	400	600	800
1008	59,5	57,8	53,2	49,4	45,6	36,8	28,5
5132	48,6	46,5	44,4	42,3	38,5	31,8	26

Tabla 3.3. Valores de conductividad obtenidos con el modelo propuesto.

AISI- SAE	Conductividad térmica , W/(m · K) medido en °C,						
	0	100	200	300	400	600	800
1008	52,2	50,1	47,6	44,7	41,6	34,7	27,3
5132	47,3	45,9	44,3	42,3	40,1	35,1	29,8

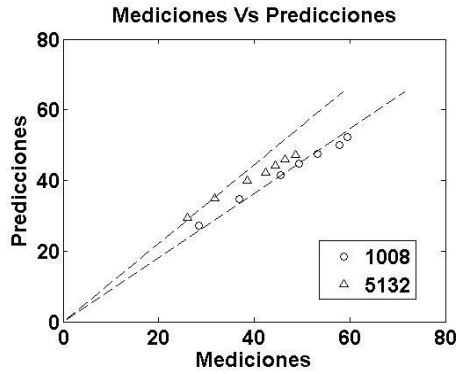


Figura 3.4. Valores predichos en función de valores normados de conductividad térmica.

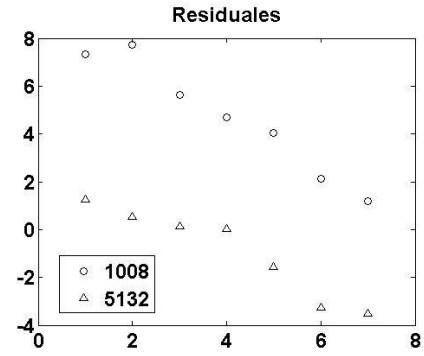


Figura 3.5. Gráfico de dispersión

3.2.2 Comparación para calor específico

Se muestran en la tabla 3.4 los valores normados de calor específico para el acero AISI 5132. En la tabla 3.5 se presentan los valores obtenidos por el modelo propuesto para la misma propiedad, el error absoluto experimental es calculado obteniéndose un valor de 9,7% y el R^2 de 0,97. En la figura 3.6 se presentan los valores normados en función de los valores que ofrece el modelo propuesto y en la figura 3.7 se muestra los residuales de dicha estimación. En la temperatura de 600°C se tiene el mayor error. Como se puede apreciar la dispersión aumenta con la temperatura.

Tabla 3.4. Valores de calor específico normados por AISI-SAE. Fuente:(Steels, 2014)

AISI- SAE	Calor específico $J/(kg \cdot K)$ medido en °C						
	0	100	200	300	400	600	800
5132	480	494	523	553	595	741	837

Tabla 3.5. Valores de calor específico obtenidos con el modelo propuesto.

AISI- SAE	Calor específico $J/(kg \cdot K)$ medido en °C						
	0	100	200	300	400	600	800
5132	475	485	499	519	546	625	747

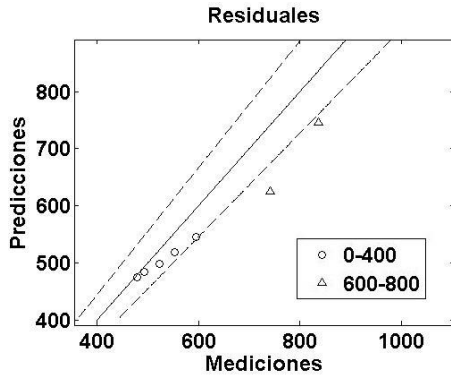


Figura 3.6. Valores predichos en función de valores normados de calor específico.

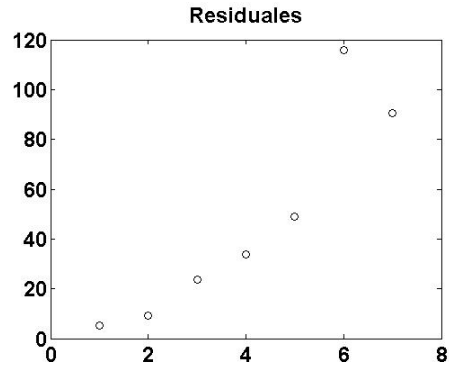


Figura 3.7. Gráfico de dispersión

3.3 Resultados obtenidos con RNA

Se introducen en el mejor modelo obtenido por RNA los valores de composición química en w% y de temperatura de trabajo en el rango de estudio para las 32 marcaciones de aceros estudiados para realizar una evaluación.

3.3.1 RNA para conductividad térmica

Para el caso de la propiedad conductividad térmica son presentados los valores medidos en función de las predicciones en la figura 3.8 y los valores residuales en la figura 3.9. El R^2 es de 0,99 y el error absoluto experimental es de 1,79%.

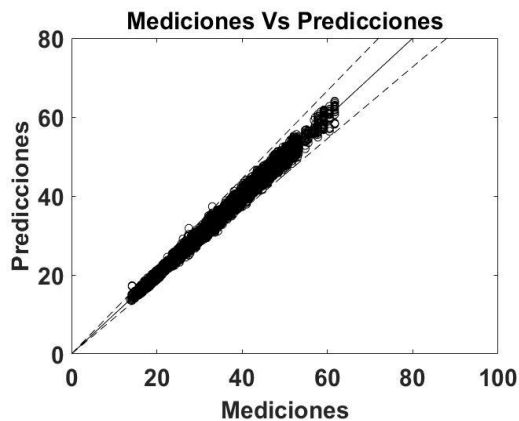


Figura 3.8 Valores predichos en función de las mediciones de conductividad térmica

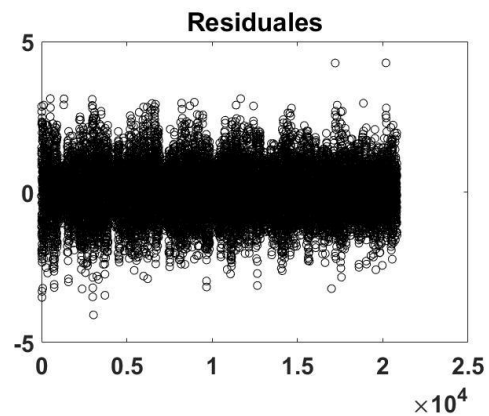


Figura 3.9. Gráfico de dispersión

3.3.2 RNA para calor específico

Son mostrados en la figura 3.10 los valores medidos de calor específico en función de los valores predichos y en la figura 3.11 los residuales correspondientes. Para este caso el valor de R^2 obtenido es de 0,99 y el error absoluto experimental de 0,71%.

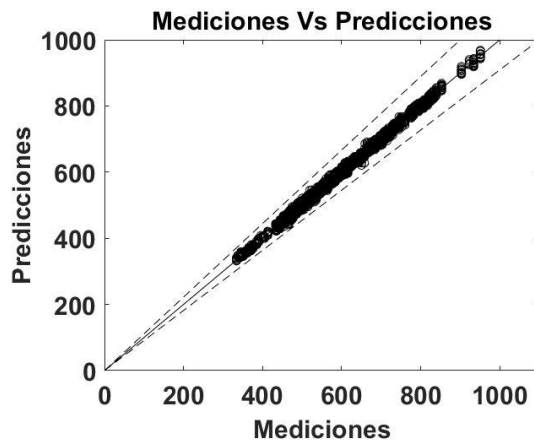


Figura 3.10 Valores predichos en función de las mediciones de calor específico

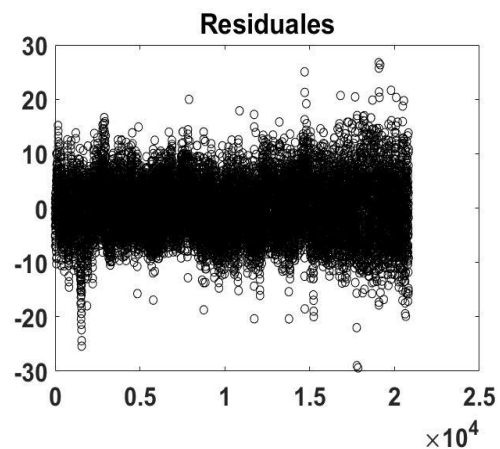


Figura 3.11. Gráfico de dispersión

3.4 Comparación del modelo RNA con valores normados.

Empleando los mismos datos que en el apartado 3.2 se realiza una comparación de los valores normados presentes en la bibliografía con los valores que resultan de la introducción en el modelo, en este caso el obtenido mediante RNA, de los valores de composición química y temperatura de trabajo de los aceros AISI 1008 y 5132 para el caso de conductividad térmica y el acero AISI 5132 para el calor específico. Los valores normados en función de los valores predichos son mostrados en las figuras 3.12 para la conductividad térmica y en la figura 3.13 para el calor específico. El valor de R^2 para la conductividad térmica es de 0,97 con error absoluto experimental de 3,5% y para el calor específico de 0,95 con error absoluto experimental de 18,6%.

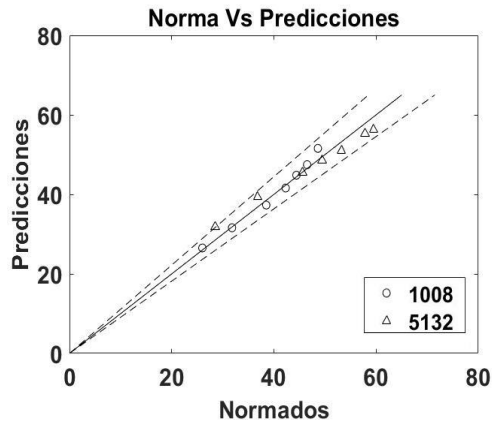


Figura 3.12 Valores predichos en función de las normados de conductividad térmica

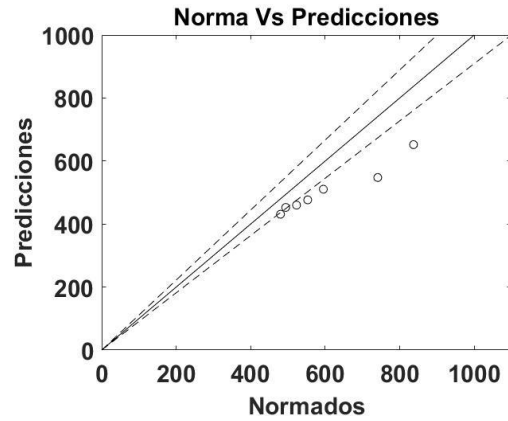


Figura 3.13. Valores predichos en función de las normados de calor específico.

Para el caso del calor específico se detecta un elevado error a partir de los 600°C, esto ocurre a causa de la diferencia entre los valores normados y los valores empleados para realizar los modelos, comparados en la tabla 3.6.

Tabla 3.6. Comparación entre valores normados y medidos de calor específico en el acero AISI 5132.

calor específico $J/(kg \cdot K)$ medido en °C							
AISI-5132	0	100	200	300	400	600	800
Norma	480	494	523	553	595	741	837
Medido	452	467	475	487	516	559	655
Diferencia	28	27	48	66	79	182	182

3.5 Comparación entre los métodos empleados

A partir del trabajo desarrollado se presentan en la tabla 3.7 los valores de R^2 y de error absoluto experimental para conductividad térmica y calor específico según los métodos empleados para modelar estas propiedades. El método que mejores resultados ofrece según estas métricas estadísticas es la RNA con función de entrenamiento Levenberg-Marquardt.

Tabla 3.7. Comparación entre métodos propuestos.

	Conductividad térmica		Calor específico	
	APF	RNA	APF	RNA
R^2	0,96	0,99	0,81	0,99
Error	5,85%	1,79%	4,4%	0,71%

3.5 Ejecución de *SteelPTF 1.0*

Para realizar el cálculo de una propiedad en el *software* diseñado el usuario deberá conocer la marcación de acero y su composición química en w%, en caso de no hacerlo se asumirán por defecto los valores medios para la marcación en cuestión. Se listan los pasos para utilizar el *software*:

1. Seleccionar la marcación de acero.
2. Introducir la temperatura a la cual se desea conocer el valor de la propiedad.
3. Seleccionar la propiedad a calcular.
4. Escribir los valores de composición química en w% del acero en cuestión.
5. Seleccionar el método de cálculo.

El usuario podrá observar, como se presenta en la figura 3.14 el valor de la propiedad y la unidad de medida en que se calculó, además podrá apreciar el gráfico de la propiedad en todo el rango de temperaturas.



Figura 3.14. Ejemplo de trabajo de la aplicación realizada.

3.6 Conclusiones parciales del capítulo

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

1. El método de APF presenta R^2 de 0,96 y el error absoluto experimental es de 5,85% para la conductividad térmica y para el caso del calor específico el R^2 obtenido es de 0,81 el error absoluto experimental de 4,4%.
2. Para el caso de la RNA el R^2 para ambas propiedades es de 0,99 y el error absoluto experimental es de 1,79% para la conductividad térmica y de 0,71% para el calor específico. La RNA resulta el método que presenta menor incertidumbre.
3. Siguiendo los pasos para emplear el *software* creado el usuario puede emplear los modelos obtenidos de forma sencilla y práctica, deberá conocer la marcación del acero en cuestión y su composición química.

CONCLUSIONES

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

1. Las relaciones entre la composición química y la temperatura de trabajo con las propiedades termo físicas del acero son no lineales, debido a la influencia en la microestructura de elementos estabilizadores de austenita o ferrita. Empleando una RNA con función de entrenamiento de retropropagación Levenberg-Marquardt se obtiene el modelo predictivo con mayor coeficiente de determinación y menor error absoluto experimental.
2. Se desarrollaron a partir de los datos experimentales disponibles modelos con capacidad de predecir la conductividad térmica y el calor específico de un grupo de 32 marcaciones de acero, presentando un nivel de incertidumbre menor a los métodos actualmente empleados.
3. Es creada una aplicación informática para el fácil empleo por el usuario de los modelos obtenidos, de esta forma el valor de uso práctico de la investigación se ve fortalecido.

RECOMENDACIONES

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

1. Los métodos aplicados para las propiedades estudiadas en este trabajo deben aplicarse para predecir la difusividad y la densidad del grupo de aceros, ya que se dispone de los datos experimentales necesarios.
2. La aplicación informática desarrollada deberá estar disponible de forma online y disponer de un registro de la actividad de los usuarios para retroalimentar las posibilidades de aplicación práctica de los modelos propuestos.
3. La investigación deberá continuar explorando métodos para obtener modelos matemáticos en función de disminuir los errores obtenidos en este trabajo. La investigación doctoral del autor de este trabajo deberá profundizar en el empleo de las ecuaciones de Maxwell para la termodinámica en función de ampliar el espectro de propiedades que se pueden predecir con los datos disponibles.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AGUIRRE GUTIÉRREZ, F. D. & CABEL MOSTACERO, C. A. 2019. Influencia del porcentaje de carbono equivalente del acero estructural soldado mediante proceso GMAW en la soldabilidad evaluada según el código AWS D1. 1.
- 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.
- AKKALATHAM, W. & TAGHIPOUR, A. 2021. Pro-environmental behavior model creating circular economy in steel recycling market, empirical study in Thailand. *Environmental Challenges*, 4, 100112.
- ALGARRA, P. S. 2006. *Métodos estadísticos aplicados*, Edicions Universitat Barcelona.
- ALPÍZAR, E. T. 2004. Apuntes acerca del Tratamiento Térmico y la Clasificación General de los Aceros. *Universidad de Matanzas, Facultad de Ingeniería Químicas y Mecánica, Cuba*.
- 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.
- ARES, A., CARAM, R., JAIME, M., FERRANDINI, P., DUTRA, A., GUEJIMAN, S. & SCHVEZOV, C. Solidificación y microestructura de un acero inoxidable austenítico. *ANALES AFA*, 2005.
- 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.
- ASKELAND, D. R., FULAY, P. P. & WRIGHT, W. J. 2017. *Ciencia e ingeniería de materiales*, Cengage learning.
- 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*.
- BOUISSA, Y., SHAHRIARI, D., CHAMPLIAUD, H. & JHAZI, 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*.

- BRAMFITT, B. L. & BENSCOTER, A. O. 2002. Metallographer's guide. *Practices and Procedures for Iron and Steels*, ASM International, 233.
- BRINGAS, J. E. Handbook of comparative world steel standards. 2002. ASTM.
- BRONSHTEIN, I. & SEMENDIAEV, K. 1973. *Manual de matemáticas para ingenieros y estudiantes*, Mir.
- CALLISTER, W. D. 2019. *Ciencia e ingeniería de los materiales*, Reverté.
- CARR, E. J. 2019. Rear-surface integral method for calculating thermal diffusivity from laser flash experiments. *Chemical Engineering Science*, 199, 546-551.
- CENGEL, Y. A. & BOLES, M. A. 2007. *Thermodynamics: An Engineering Approach 6th Edition (SI Units)*, The McGraw-Hill Companies, Inc., New York.
- CORREA-BAENA, J.-P., HIPALGAONKAR, K., VAN DUREN, J., JAFFER, S., CHANDRASEKHAR, V. R., STEVANOVIC, V., WADIA, C., GUHA, S. & BUONASSISI, T. 2018. Accelerating Materials Development via Automation, Machine Learning, and High-Performance Computing. *Joule*, 2, 1410-1420.
- CVERNA, F. 2006. *Worldwide guide to equivalent irons and steels*, ASM international.
- CHUN, Y.-B. 2022. Influences of carbon concentration on microstructure and tensile properties of Fe-18Mn-9Cr-2Al-xC steels. *Materials Science and Engineering: A*, 830, 142289.
- 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.
- DONG, G., LI, X., ZHAO, J., SU, S., MISRA, R. D. K., XIAO, R. & SHANG, C. 2020. Machine learning guided methods in building chemical composition-hardening model for wear-resistant steel. *Materials Today Communications*, 24, 101332.
- ESHKABILOV, S., ARA, I., SEVOSTIANOV, I., AZARMI, F. & TANGPONG, X. 2021. Mechanical and thermal properties of stainless steel parts, manufactured by various technologies, in relation to their microstructure. *International Journal of Engineering Science*, 159, 103398.
- FAUSETT, L. V. 2006. *Fundamentals of neural networks: architectures, algorithms and applications*, Pearson Education India.
- 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.

- 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.
- GOKCEN, N. A. 2012. *Statistical thermodynamics of alloys*, Springer Science & Business Media.
- 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.
- 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.
- 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.
- HANDBOOK, A. 1990. Properties and selection: irons, steels, and high-performance alloys. *ASM international*, 1, 140-194.
- HARVEY, L. D. D. 2021. Iron and steel recycling: Review, conceptual model, irreducible mining requirements, and energy implications. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 138, 110553.
- 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, 11611-11621.
- 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.
- HU, J., ZHANG, Y., YANG, X., LI, H., XU, H., MA, C., DONG, Q., GUO, N. & 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.
- HU, N., CHIANG, S. W., YI, J., LI, X., LI, J., DU, H., XU, C., HE, Y., LI, B. & 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.
- HUA, G., LI, C., CHENG, X., ZHAO, X., FENG, Q., LI, Z., LI, D. & 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.
- ITO, H., SUZUKI, Y., NISHIKAWA, H., KINEFUCHI, M., ENOKI, M. & SHIBANUMA, K. 2020. Multiscale model prediction of ferritic steel fatigue strength based on microstructural information, tensile properties, and loading conditions (no adjustable material constants). *International Journal of Mechanical Sciences*, 170, 105339.
- IZAURIETA, F. & SAAVEDRA, C. 2000. Redes neuronales artificiales. *Departamento de Física, Universidad de Concepción Chile*.
- JAFARIAN, H. R., SABZI, M., MOUSAVI ANIJAN, 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.
- JUNG, I. D., SHIN, D. S., KIM, D., LEE, J., LEE, M. S., SON, H. J., REDDY, N. S., KIM, M., MOON, S. K., KIM, K. T., YU, J.-H., KIM, S., PARK, S. J. & SUNG, H. 2020. Artificial intelligence for the prediction of tensile properties by using microstructural parameters in high strength steels. *Materialia*, 11, 100699.
- KUTZ, M. 2015. *Mechanical engineers' handbook, volume 1: Materials and engineering mechanics*, John Wiley & Sons.
- LAJTIN, Y. M. 1977. *Metalografía y tratamiento térmico de los metales*, Mir.
- LEONT'EV, L., TSUKANOV, V. & SMIRNOVA, D. 2021. DK Chernov's role in creating and developing the doctrine of modern metallurgy and metal science. Part 2. Scientific and practical confirmation of DK Chernov's ideas. *Izvestiya. Ferrous Metallurgy*, 63, 873-877.
- 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.
- 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.
- 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*.

- 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.
- MEDINA, Y. C. 2020. *Introducción a la termotransferencia*, Editorial Universitaria (Cuba).
- MENG, T. X., GUO, Q., XI, W., DING, W. Q., LIU, X. Z., LIN, N. M., YU, S. W. & 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.
- MIRANDA, G., FARIA, S., BARTOLOMEU, F., PINTO, E., MADEIRA, S., MATEUS, A., CARREIRA, P., ALVES, N., SILVA, F. S. & 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.
- MONVAGA. 2020. Available: <http://monvaga.com/noticias/la-industria-del-acero-y-su-impacto-economico-y-social>.
- 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, 212-216.
- 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.
- NEUMANN, F. & DÖTSCH, E. 1975. Thermodynamics of Fe-C-Si melts with particular emphasis on the oxidation behavior of carbon and silicon. *Giessereiforschung*, 27, 318-38.

- 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.
- OBBERG, E. & JONES, F. D. 2020. *Machinery's handbook*, Industrial press.
- PACYNA, J. & DĄBROWSKI, R. 2006. Vanadium influence upon changes at tempering steels of small content of other elements. *Journal of Materials Processing Technology*, 175, 330-333.
- 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, 1679-1684.
- 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, 2602-2608.
- PEÑA, D. 2002. *Análisis de datos multivariantes*, 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.
- RAGHAVAN, V. 1995. Effect of manganese on the stability of austenite in Fe-Cr-Ni alloys. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 26, 237-242.
- RAGHAVAN, V. 2007. Phase Diagram Evaluations. *Journal of Phase Equilibria and Diffusion*, 28, 172-172.
- 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, 93-105.
- REED-HILL, R. E. 1982. *Principios de metalurgia física*.
- RODRÍGUEZ-JAUME, M.-J. & MORA CATALÁ, R. 2001. Análisis de regresión múltiple. *Técnicas de investigación social II*.
- RUEDA PEIRO, I., GONZÁLEZ MARÍN, M. L. & ÁLVAREZ MOSSO, L. 1990. *El capitalismo ya no es de acero*, Ediciones quinto sol.
- SALAS, Z. P. F. & MAGDALEÓN, F. D. 2009. INFLUENCIA DEL CARBONO EN LAS PROPIEDADES DEL ACERO PARA REFUERZO DE HORMIGÓN. *Tecnología Química*, 29, 60-69.
- SAOUDI, A., FELLAH, M., HEZIL, N., LERARI, D., KHAMOULI, F., ATOUI, L. H., BACHARI, K., MOROZOVA, J., OBROSOV, A. & ABDUL SAMAD, M. 2020.

- Prediction of mechanical properties of welded steel X70 pipeline using neural network modelling. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 186, 104153.
- SHACKELFORD, J. F. & GUEMES, A. 1998. *Introducción a la Ciencia de Materiales para Ingenieros*, Prentice Hall.
- 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, 188-195.
- 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.
- SOUSA, J. 2011. A Levenberg-Marquardt algorithm for fitting σ -w curves from three-point bend tests for plain and fiber reinforced concretes. *Revista IBRACON de Estruturas e Materiais*, 4, 691-694.
- STEELS, H.-S. L.-A. 2014. ASM Handbook, Volume 1, Properties and Selection: Irons, Steels, and High Performance Alloys Section: Carbon and Low-Alloy Steels.
- STEFANESCU, D. M. & KATZ, S. 1988. Thermodynamic properties of iron-base alloys. *ASM Handbook*, 15, 61-70.
- 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, 4627-4632.
- 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.
- 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.
- TERADA, Y., OHKUBO, K., MOHRI, T. & SUZUKI, T. 2002. Effects of alloying additions on thermal conductivity of ferritic iron. *ISIJ international*, 42, 322-324.
- THIBAUT, J. & GRANDJEAN, B. P. A. 1991. A neural network methodology for heat transfer data analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34, 2063-2070.

- 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.
- VIVAS, H. 2014. *Optimización en entrenamiento del perceptrón multicapa*. Tesis de Maestría. Universidad del Cauca, Popayán, Colombia.[Links].
- 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.
- WORLDSTEEL. 2021. Available: <https://www.worldsteel.org/dms/internetDocumentList/bookshop>.
- 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.
- 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.
- ZURADA, J. 1992. *Introduction to artificial neural systems*, West Publishing Co.

ANEXOS

Anexo 1. Nomenclatura de los aceros según AISI-SAE. Fuente(Oberg and Jones, 2020)

Designación AISI-SAE	Tipo de acero y porcentaje nominal de aleación (%)
	Aceros al carbono
10xx	Acero sin aleación (Mn 1.00% máx.)
11xx	Resulfurizado
12xx	Resulfurizado y Refosforado
15xx	Acero sin aleación (Max. Mn rango 1.00 a 1.65%)
	Aceros al manganeso
13xx	Mn 1.75
	Aceros al níquel
23xx	Ni 3.50
25xx	Ni 5.00
	Aceros al níquel-cromo
31xx	Ni 1.25; Cr 0.65 and 0.80
32xx	Ni 1.75; Cr 1.07
33xx	Ni 3.50; Cr 1.50 and 1.57
34xx	Ni 3.00; Cr 0.77
	Aceros al molibdeno
40xx	Mo 0.20 and 0.25
44xx	Mo 0.40 and 0.52
	Aceros al cromo-molibdeno
41xx	Cr 0.50, 0.80, and 0.95; Mo 0.12, 0.20, 0.25, and 0.30
	Aceros al níquel-cromo-molibdeno
43xx	Ni 1.82; Cr 0.50 and 0.80; Mo 0.25
43BVxx	Ni 1.82; Cr 0.50; Mo 0.12 and 0.35; V 0.03 min.
47xx	Ni 1.05; Cr 0.45; Mo 0.20 and 0.35
81xx	Ni 0.30; Cr 0.40; Mo 0.12
86xx	Ni 0.55; Cr 0.50; Mo 0.20
87xx	Ni 0.55; Cr 0.50; Mo 0.25
88xx	Ni 0.55; Cr 0.50; Mo 0.35
93xx	Ni 3.25; Cr 1.20; Mo 0.12
94xx	Ni 0.45; Cr 0.40; Mo 0.12
97xx	Ni 0.55; Cr 0.20; Mo 0.20
98xx	Ni 1.00; Cr 0.80; Mo 0.25
	Aceros al níquel-molibdeno
46xx	Ni 0.85 and 1.82; Mo 0.20 and 0.25
48xx	Ni 3.50; Mo 0.25
	Aceros al cromo
50xx	Cr 0.27, 0.40, 0.50, and 0.65
51xx	Cr 0.80, 0.87, 0.92, 0.95, 1.00, and 1.05
50xxx	Cr 0.50; C 1.00 min.
51xxx	Cr 1.02; C 1.00 min
52xxx	Cr 1.45; C 1.00 min
	Aceros al cromo-vanadio
61xx	Cr 0.60, 0.80, and 0.95; V 0.10 and 0.15 min
	Aceros al cromo-tungsteno

72xx		W 1.75; Cr 0.75
		Aceros al silicio-manganeso
92xx		Si 1.40 and 2.00; Mn 0.65, 0.82, and 0.85; Cr 0.00 and 0.65
		Aceros de alta resistencia y baja aleación
9xx		Varios grados SAE
xxBxx		B denota aceros al boro
xxLxx		L denota aceros al plomo
AISI	SAE	Aceros inoxidable
2xx	302xx	Aceros al cromo-manganeso-níquel/Austenítico
3xx	303xx	Aceros al cromo-níquel/Austenítico
4xx	514xx	Aceros al cromo/Ferrítico
5xx	515xx	Aceros al cromo

Anexo 2. Carta 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 3. Rango de validez de los modelos obtenidos para cada marcación de acero.

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
405	min	0,03	0,7	0,02	0,02	0,5	0	11,5	0	0
	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. Código para implementar el APF en Matlab.

```
%conductividad térmica por el método de aproximación progresiva defunciones

%-----borra pantalla
clearall;
clc;

%carga datos

load('AISIVM');
load ('AISIVMcomp');

%-----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 conductividad térmica

    y=AISIVM(fila , : );
plot (T,y,'ko');
title('Conductividad termica');
xlabel ('Temperatura');
ylabel('Conductividad termica');
    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;

R=round(R*1e3)/1e3;

%-----Correlacionando R1 con b, polinomio grado 2
XR1=R( :, 1);
Yb=R( :, 3);
plot (XR1,Yb,'ko');
title('R1 Vs b');
xlabel ('R1');
ylabel('b');
set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold');
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold');
pp=polyfit(XR1,Yb,2);
pp=round(pp*1e3)/1e3;
disp(num2str(pp))
%% Fit: 'untitled fit 1'.
[xData, yData] = prepareCurveData( XR1, Yb );
% Set up fitype and options.
ft = fitype( 'poly2' );
opts = fitoptions( ft );
opts.Lower = [-Inf -Inf -Inf];
opts.Upper = [Inf Inf Inf];
% Fit model to data.
[fitresult, gof] = fit( xData, yData, ft, opts );
sss=gof.rsquare;
sss=round(sss*1e3)/1e3;
disp(num2str(sss))

%-----Correlacionando R1 con c por recta
Yc=R( :, 4);
plot (XR1,Yc,'ko');
title('R1 Vs c');
xlabel ('R1');
ylabel('c');
set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold');
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold');
ppp=polyfit(XR1,Yc,1);
ppp=round(ppp*1e3)/1e3;
disp(num2str(ppp))
CD1=corrcoef(XR1,Yc);

```

```

CD1(1,2);
rr=CD1(1,2);
rdd=rr^2;
disp(num2str(rdd))
%-----figuras
figure;
plot(XR1, Yb, '.c');
figure;
plot(XR1, Yc, '.b');

%-----Evaluar resultados
x1=pp(1,1);
x2=pp(1,2);
x3=pp(1,3);
x4=ppp(1,1);
x5=ppp(1,2);

%-----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 ;
Y1=round(Y1*1e3)/1e3;
Y2=round(Y2*1e3)/1e3;
for col =1:7;
    Tc=T(1,col);
k1=Y1*Tc+Y2;
k1=round(k1*1e3)/1e3;
k1z(filaa ,col )= [k1];
end
I1(filaa ,: )=[Y1 Y2];
end;
%-----Cálculo del Error

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

%-----Organizando
Rr = zeros(32 , 21);
Rr( :, 1:5)= R;
Rr( :, 6:7)= I1;
Rr( :, 8:14)= k1z;
Rr(:, 15:21)=Error;

%-----2da aproximación-----

```

```

k2=(AISIVM./k1z)*10000;
k2=round(k2*1e3)/1e3;

%-----Correlacionando T con conductividad térmica (polinomio ^2)

    Rr2=zeros(32 , 4);

forfilaaa = 1:32;
y1=k2( filaaa, : );
plot (T,y1,'ko');
title('T Vs ConductividadTermica');
xlabel ('T');
ylabel('ConductividadTermica');
pppp=polyfit(T,y1,2);
pppp=round(pppp*1e4)/1e4;
%% Fit: 'untitled fit 1'.
[xData, yData] = prepareCurveData( T, y1 );
% Set up fitype and options.
ft = fitype( 'poly2' );
opts = fitoptions( ft );
opts.Lower = [-Inf -Inf -Inf];
opts.Upper = [InfInfInf];
% Fit model to data.
[fitresult, gof] = fit( xData, yData, ft, opts );
ssss=gof.rsquare;
ssss=round(ssss*1e3)/1e3;
Rr2(filaaa,:)=[ppppssss];
end

%-----Correlacionando R2 con d (polinomio ^2)
XR12=R( :, 2);
Yb12=Rr2( :, 1);
plot (XR12,Yb12,'ko');
title('R2 Vs d');
xlabel ('R2');
ylabel('d');
set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold');
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold');
ppr2c=polyfit(XR12,Yb12,2);
ppr2c=round(ppr2c*1e3)/1e3;
disp(num2str(ppr2c))
%% Fit: 'untitled fit 1'.
[xData, yData] = prepareCurveData( XR12, Yb12 );
% Set up fitype and options.
ft = fitype( 'poly2' );
opts = fitoptions( ft );

```



```

opts.Lower = [-Inf -Inf -Inf];
opts.Upper = [Inf Inf Inf];
% Fit model to data.
[fitresult, gof] = fit( xData, yData, ft, opts );
sssr2c=gof.rsquare;
sssr2c=round(sssr2c*1e3)/1e3;
disp(num2str(sssr2c))

%-----Correlacionando R2 con e (polinomio ^2)
XR13=R( :, 2);
Yb13=Rr2( :, 2);
plot (XR13,Yb13,'ko');
title('R2 Vs e');
xlabel ('R2');
ylabel('e');
set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold');
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold');
ppr2d=polyfit(XR13,Yb13,2);
ppr2d=round(ppr2d*1e3)/1e3;
disp(num2str(ppr2d))
%% Fit: 'untitled fit 1'.
[xData, yData] = prepareCurveData( XR13, Yb13 );
% Set up fitype and options.
ft = fitype( 'poly2' );
opts = fitoptions( ft );
opts.Lower = [-Inf -Inf -Inf];
opts.Upper = [Inf Inf Inf];
% Fit model to data.
[fitresult, gof] = fit( xData, yData, ft, opts );
sssr2d=gof.rsquare;
sssr2d=round(sssr2d*1e3)/1e3;
disp(num2str(sssr2d))

%-----Correlacionando R2 con f (polinomio ^2)
XR14=R( :, 2);
Yb14=Rr2( :, 3);
plot (XR14,Yb14,'ko');
title('R2 Vs f');
xlabel ('R2');
ylabel('f');
set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold');
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold');
ppr2e=polyfit(XR14,Yb14,2);
ppr2e=round(ppr2e*1e3)/1e3;
disp(num2str(ppr2e))
%% Fit: 'untitled fit 1'.

```

```

[xData, yData] = prepareCurveData( XR14, Yb14 );
% Set up fittype and options.
ft = fittype( 'poly2' );
opts = fitoptions( ft );
opts.Lower = [-Inf -Inf -Inf];
opts.Upper = [Inf Inf Inf];
% Fit model to data.
[fitresult, gof] = fit( xData, yData, ft, opts );
sssr2e=gof.rsquare;
sssr2e=round(sssr2e*1e3)/1e3;
disp(num2str(sssr2e))

%-----Calculando Valores de segunda iteracion
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);
Y3=round(Y3*1e3)/1e3;
Y4=round(Y4*1e3)/1e3;
Y5=round(Y5*1e3)/1e3;
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;
Ok=round(Ok*1e3)/1e3;

Error2=abs(((AISIVM-Ok)./Ok).*100);
%figurappt
plot(AISIVM,Ok,'ko');
hold 'on'
title('Mediciones Vs Predicciones');
xlabel ('Mediciones');
ylabel('Predicciones');
set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold')
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold')
ppp=polyfit(Ok,AISIVM,1);
disp(num2str(ppp))

```

```
cd=corrcoef(Ok,AISIVM);
cd(1,2);
rR=cd(1,2);
rdD=rR^2;
disp(num2str(rdD))
Xxx=0:65;
Yyy=1.1*Xxx;
plot(Yyy,Xxx,'k--')
hold on;
Yyym=0.9*Xxx;
plot(Yyym,Xxx,'k--')
hold on;
Yy=Xxx;
plot(Yy,Xxx,'k--')

plot(AISIVM-Ok,'ko');
hold 'on'
title('Residuales');
    set(gca,'FontSize',18,'fontWeight','bold');
set(findall(gcf,'type','text'),'FontSize',18,'fontWeight','bold');

%----errores totales--
Errototal1=sum(sum (Error))/(32*7);
Errototal2=sum(sum (Error2))/(32*7);
```