

## CARACTERIZACIÓN DEL PROCESO DE TRANSFERENCIA DE CALOR SUPERFICIAL DURANTE UN TRATAMIENTO TÉRMICO DE AUSTEMPERADO UTILIZANDO EL MÉTODO INVERSO CUASI-NEWTON SECUENCIAL

### CHARACTERIZING THE SURFACE HEAT TRANSFER PROCESS DURING AN AUSTEMPERING HEAT TREATMENT BY USING THE INVERSE SEQUENTIAL QUASI-NEWTON METHOD

Benjamin A. Tourn<sup>a</sup>, Juan C. Álvarez Hostos<sup>b</sup> y Victor D. Fachinotti<sup>b</sup>

<sup>a</sup>Centro de Investigación y Transferencia Rafaela (UNRaf-CONICET), Santa Fe, Argentina,

<sup>b</sup>Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), Universidad Nacional del Litoral (UNL)/Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), Predio CCT-CONICET Santa Fe, Argentina, <https://cimec.org.ar/>

**Palabras clave:** PTICC, MCNS, MGC, ADI, Flujo de calor.

**Resumen.** En este trabajo implementamos el método inverso cuasi-Newton secuencial (MCNS) para caracterizar el proceso de transferencia de calor superficial durante el tratamiento térmico de austemperado de una probeta de hierro dúctil. El modelado numérico de las condiciones de borde presentes durante un proceso de transferencia de calor a partir de mediciones de temperatura obtenidas dentro del espécimen de análisis, es llevado a cabo de manera secuencial o “en línea”. Por otra parte, el modelado del problema térmico se llevó a cabo utilizando una formulación no lineal en una geometría axisimétrica. Los resultados muestran que la curva de evolución temporal del flujo de calor superficial obtenida con el MCNS exhibió un ajuste muy preciso en comparación con la curva de referencia, a pesar de la no linealidad del problema. El método mostró ser una alternativa tanto confiable como apropiada para el cómputo en línea de las condiciones de borde superficiales en la probeta durante el tratamiento térmico.

**Keywords:** IHCP, SQNM, CGM, ADI, Heat flux.

**Abstract.** In this work, we implemented the inverse sequential quasi-Newton method (SQNM) for characterizing the surface heat transfer process during an austempering heat treatment of a ductile iron specimen. The numerical modelling of the boundary conditions during a heat transfer process from temperature measurements obtained within the specimen is performed in a sequential or “online” manner. On the other hand, the thermal model was carried out using a non-linear formulation in an axisymmetric geometry. The results show that the temporal surface heat flux obtained with the SQNM exhibited a close agreement compared to the reference curve, despite the non-linearities of the problem. The proposed method was a suitable and reliable alternative for the online computation of the boundary conditions at the surface of the specimen during the heat treatment.

## 1. INTRODUCCIÓN

Los problemas térmicos inversos de conducción de calor (PTICC) representan un área de estudio de gran interés para científicos e ingenieros debido a sus múltiples aplicaciones prácticas (Beck et al., 1985). Entre ellas, podemos mencionar la caracterización de fenómenos de transferencia térmica superficial en el contexto de procesos de tratamiento térmico de metales (Felde y Réti, 2010; Vázquez-Gómez et al., 2012; Slodička et al., 2010), a través de la estimación de condiciones de contorno incluyendo flujos de calor superficial, coeficientes de transferencia, y radiación térmica. Uno de los objetivos que persigue esta aplicación es la mejora en la eficiencia de los procesos industriales de tratamiento térmico.

En el contexto planteado, el desarrollo de un PTICC implica la construcción de un modelo cuyas entradas son mediciones de temperatura registradas en el interior de un cuerpo sometido a un proceso de tratamiento térmico, y cuya salida es la estimación espacial y transiente de las condiciones de transferencia de calor superficial (Beck et al., 1985; Ozisik et al., 2002). Este modelo (y al igual que cualquier modelo de problema inverso) es extremadamente sensible con respecto a errores en los datos de entrada. La estrategia matemática que permite atenuar este inconveniente y obtener respuestas significativas desde el punto de vista práctico se conoce como regularización (Beck et al., 1985; Ozisik et al., 2002).

En general, el enfoque numérico resulta apropiado para hallar una solución a los PTICC debido a la extrema dificultad para obtener soluciones analíticas, especialmente en casos de geometrías complejas y/o de presencia de múltiples datos e incógnitas. En este contexto, los métodos existentes pueden clasificarse dentro de dos grandes categorías: i) de dominio completo; y ii) secuenciales (Ozisik et al., 2002). Los primeros se caracterizan porque el algoritmo de resolución computa todos los valores discretos de la variable desconocida simultáneamente, para lo cual necesita disponer *a priori* de todas las mediciones de temperatura. En contraste, los métodos secuenciales tienen la capacidad de computar la variable desconocida casi al mismo tiempo que se generan los datos de mediciones de temperatura.

El método de gradiente conjugado (MGC) acoplado a la formulación de los problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad (Ozisik et al., 2002; Alifanov, 2012), tanto en su versión secuencial (Kim et al., 2003; Tourn et al., 2021) como de dominio completo (Razzaghi et al., 2019), es uno de los métodos de estimación inversa más ampliamente utilizados. La implementación de dichos problemas auxiliares evita el computacionalmente costoso cálculo de la sensibilidad del problema respecto a la incógnita en cada paso de tiempo, especialmente en problemas no-lineales. El uso de este método en el contexto de fenómenos de transferencia de calor superficial ha sido ampliamente discutido y probado (Kim et al., 2003; Razzaghi et al., 2019; Tourn et al., 2021).

El presente trabajo se focaliza en la implementación de un método inverso secuencial basado en gradiente para la caracterización de un flujo de calor superficial, en el contexto de un problema térmico bidimensional no-lineal axisimétrico correspondiente a un proceso de tratamiento térmico de austemperado de una probeta de hierro dúctil. La no-linealidad es producto de la dependencia de las propiedades termo-físicas con la temperatura. Dicha implementación es una extensión del método introducido por Tourn et al. (2021), el cual emplea una técnica cuasi-Newton para computar la dirección de descenso en lugar de una estrategia tradicional de direcciones conjugadas, permitiendo así proveer soluciones más estables (Tourn et al., 2021).

Lo que resta de este trabajo se organiza de la siguiente manera: en la sección 2 exponemos el problema térmico bidimensional axisimétrico y su implementación numérica; en la sección 3 definimos el PTICC; en la sección 4 introducimos el método inverso propuesto en este trabajo;

en la sección 5 mostramos la configuración del caso práctico en el que se aplicará el MCNS; en la sección 6 presentamos los resultados obtenidos y proponemos una discusión adecuada de los mismos; y por último en la sección 7 establecemos las conclusiones pertinentes.

## 2. PROBLEMA TÉRMICO DIRECTO

### 2.1. Ecuaciones de gobierno

Consideremos una geometría bidimensional axisimétrica como la mostrada en la figura 1. El modelo matemático de transferencia de calor puede expresarse a través del problema con condiciones iniciales y de borde (PCIB) dado por el siguiente sistema de ecuaciones:

$$\rho c(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial z} \right), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, t > 0 \quad (1a)$$

$$k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_0, \quad t > 0 \quad (1b)$$

$$-k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = q(t), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_R, \quad t > 0 \quad (1c)$$

$$-k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = h[T(\mathbf{x}, t) - T_\infty], \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_H, \quad t > 0 \quad (1d)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0, \quad (1e)$$

donde  $T(\mathbf{x}, t)$  es la temperatura en un punto  $\mathbf{x} = (r, z) \in \Omega$  en el tiempo  $t$ ,  $\rho c(T)$  y  $k(T)$  son las propiedades termo-físicas del material dependientes de la temperatura,  $\Gamma_0$  la frontera coincidente con los ejes de simetría de la geometría (donde el vertical constituye un eje de revolución),  $\Gamma_R$  la frontera radial correspondiente con la superficie cilíndrica externa de la geometría en la que actúa un flujo de calor superficial dependiente del tiempo  $q(t)$ ,  $\Gamma_H$  la frontera circular superior en la que actúa la condición de Robin caracterizada por coeficiente de transferencia térmica superficial  $h$  y la temperatura del medio circundante  $T_\infty$  (ambos conocidos), y  $T_0$  es la temperatura inicial en el dominio  $\Omega$  en el instante  $t = 0$ .

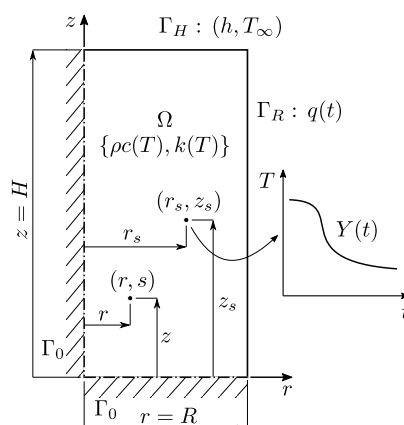


Figura 1: Geometría del problema bidimensional axisimétrico.

### 2.2. Formulación de elementos finitos

Utilizaremos el método de elementos finitos (MEF) para la resolución numérica del PCIB (1). El campo de temperatura en cualquier punto del dominio puede ser aproximado como  $T(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{T}(t)$ ,  $\forall \mathbf{x} \in \Omega$ , donde  $\mathbf{N}(\mathbf{x})$  es el vector de funciones de forma asociado a cada nodo de la malla y  $\mathbf{T}(t)$  es el vector de temperaturas nodales (desconocido). Luego de

debilitar y discretizar el conjunto de ecuaciones (1), y utilizando una esquema de integración temporal implícito tipo Euler hacia atrás con un paso uniforme  $\Delta t$ , obtenemos el siguiente conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales:

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}^{(m)}) = \left( \frac{\mathbf{C}^{(m)}}{\Delta t} + \mathbf{K}^{(m)} \right) \mathbf{T}^{(m)} - \frac{\mathbf{C}^{(m)}}{\Delta t} \mathbf{T}^{(m-1)} - \mathbf{Q}^{(m)} = \mathbf{0}, \quad (2)$$

donde  $(*)^{(m)}$  es  $(*)$  evaluado en  $t_m \equiv t = m\Delta t$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$ , (siendo  $M$  el número total de pasos de tiempo),  $\mathbf{C}^{(m)} \equiv \mathbf{C}(\mathbf{T}^{(m)})$  es la matriz de capacitancia,  $\mathbf{K}^{(m)} \equiv \mathbf{K}(\mathbf{T}^{(m)})$  es la matriz de conductividad, y  $\mathbf{Q}^{(m)} \equiv \mathbf{Q}(\mathbf{T}^{(m)})$  es el vector de cargas, dados por

$$\mathbf{C}^{(m)} = \int_{\Omega} \rho c^{(m)} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Omega, \quad (3a)$$

$$\mathbf{K}^{(m)} = \int_{\Omega} k^{(m)} \nabla \mathbf{N}^T \nabla \mathbf{N} d\Omega + h \int_{\Gamma_H} \mathbf{N}^T \mathbf{N} d\Gamma, \quad (3b)$$

$$\mathbf{Q}^{(m)} = q^{(m)} \int_{\Gamma_R} \mathbf{N} d\Gamma + h T_{\infty} \int_{\Gamma_H} \mathbf{N} d\Gamma. \quad (3c)$$

Podemos apreciar que la dependencia temporal de la condición de borde (1c) implica la definición de un vector cuyas componentes están dadas por el flujo  $q(t)$  evaluado en cada instante de tiempo:  $\mathbf{q} = [q^{(1)}, q^{(2)}, \dots, q^{(m)}, \dots, q^{(M)}]^T$ .

En el primer paso de tiempo ( $m = 1$ ), el vector de temperaturas nodales correspondiente  $\mathbf{T}^{(0)}$  está dado por la condición inicial. El campo de temperaturas transiente en todo el dominio es obtenido secuencialmente en cada paso de tiempo. Debido a la no-linealidad, la solución de la ecuación (2) es obtenida mediante un esquema Newton-Rapshon.

### 3. PROBLEMA TÉRMICO INVERSO DE CONDUCCIÓN DE CALOR

Consideremos ahora que el flujo de calor  $q(t)$  en la ecuación (1c) es desconocido, y que al mismo tiempo disponemos de una historia de temperaturas  $Y(t)$  en un determinado punto interior  $s$  (sensor) de la geometría (ver figura 1). Dicho punto representa la posición donde se podría instalar una termocupla encargada de registrar las temperaturas en el interior de un cuerpo en un experimento real. El objetivo del PTICC es estimar tal condición de borde a través de algún procedimiento especialmente diseñado (el cual expondremos en detalle en la sección siguiente), utilizando la historia  $Y(t)$  como dato de entrada para el modelo (Ozisik et al., 2002). La característica principal de esta formulación es su mal condicionamiento debido a la extrema sensibilidad del modelo con los datos de entrada (Beck et al., 1985). De hecho, la historia  $Y(t)$  puede provenir no solo de una medición real (la cual inherentemente conlleva ruido y errores), sino también de una simulación numérica. En tal caso, los datos generados son corrompidos artificialmente con ruido blanco. Ya sea que los datos provengan de una u otra fuente, supondremos que su desviación estándar  $\sigma$  es conocida.

### 4. MÉTODO QUASI-NEWTON SECUENCIAL

En lo que sigue, asumimos que la función desconocida  $q(t)$  pertenece al espacio de Hilbert de las funciones cuadrado-integrable  $L_2(t_0, t_f)$  en el dominio  $t_0 \leq t \leq t_f$  (Alifanov, 2012).

#### 4.1. Derivación de los problemas de sensibilidad y adjunto

Partimos de la función de sensibilidad  $\Delta T(\mathbf{x}, t)$ , la cual se define como la derivada direccional de  $T(\mathbf{x}, t)$  en la dirección de la perturbación de la función desconocida, a determinar. En

primer lugar, el problema perturbado se obtiene al reemplazar  $T(\mathbf{x}, t)$  y  $q(t)$  en el conjunto (1) por las cantidades perturbadas  $T(\mathbf{x}, t) + \Delta T(\mathbf{x}, t)$  y  $q(t) + \Delta q(t)$ , donde  $\Delta q(t)$  es también una función que pertenece al espacio de Hilbert  $L_2(t_0, t_f)$ . De esta manera, el problema de sensibilidad queda definido luego de sustraer el problema perturbado del problema original (1) (Ozisk et al., 2002; Razzaghi et al., 2019), como

$$\rho c(T) \frac{\partial \Delta T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k(T) \frac{\partial \Delta T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( k(T) \frac{\partial \Delta T(\mathbf{x}, t)}{\partial z} \right), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, t > 0 \quad (4a)$$

$$k(T) \frac{\partial \Delta T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_0, \quad t > 0 \quad (4b)$$

$$-k(T) \frac{\partial \Delta T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = \Delta q(t), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_R, \quad t > 0 \quad (4c)$$

$$-k(T) \frac{\partial \Delta T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = h \Delta T(\mathbf{x}, t), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_H, \quad t > 0 \quad (4d)$$

$$\Delta T(\mathbf{x}, 0) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0, \quad (4e)$$

Luego, escribimos la expresión de la siguiente función objetivo

$$S[q(t)] = \int_{t_0}^{t_f} [T(\mathbf{x}_s, t; q(t)) - Y(t)]^2 dt, \quad (5)$$

la cual también podemos expresar en su versión aumentada mediante el uso del multiplicador de Lagrange  $\lambda(\mathbf{x}, t)$ ,

$$S[q(t)] = \int_0^{t_f} [T(\mathbf{x}_s, t; q(t)) - Y(t)]^2 dt + \dots \\ \dots \int_0^{t_f} \int_{\Omega} \lambda(\mathbf{x}, t) \left\{ \rho c(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left( k(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial z} \right) \right\} d\Omega dt, \quad (6)$$

donde  $d\Omega = 2\pi r dr dz$  debido a la condición de axisimetría. Nótese que la igualdad entre las expresiones (5) y (6) es válida debido a que la expresión entre llaves en (6) es igual a cero debido a la ecuación (1a). El problema adjunto que se escribe a continuación se obtiene reemplazando  $T(\mathbf{x}, t)$  por  $[T(\mathbf{x}, t) + \Delta T(\mathbf{x}, t)]$  y  $q(t)$  por  $[q(t) + \Delta q(t)]$  en la ecuación (6), sustrayendo los resultados de la ecuación (6), utilizando las condiciones de borde e iniciales del problema de sensibilidad (4), y anulando los términos que contienen  $\Delta T(\mathbf{x}, t)$  (Razzaghi et al., 2019; Tourn et al., 2021):

$$\rho c(T) \frac{\partial \lambda(\mathbf{x}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (k(T) \nabla \lambda(\mathbf{x}, t)) = 2[T(\mathbf{x}, t; q(t)) - Y(t)] \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_s), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, t_0 \leq t < t_f \quad (7a)$$

$$k(T) \frac{\partial \lambda(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_0, \quad t_0 \leq t < t_f \quad (7b)$$

$$-k(T) \frac{\partial \lambda(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_R, \quad t_0 \leq t < t_f \quad (7c)$$

$$-k(T) \frac{\partial \lambda(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = h \lambda(\mathbf{x}, t), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_H, \quad t_0 \leq t < t_f \quad (7d)$$

$$\lambda(\mathbf{x}, t_f) = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = t_f. \quad (7e)$$

Debido a la equivalencia matemática entre los problemas térmico (1), de sensibilidad (4) y adjunto (7), todos ellos se resolverán empleando la misma formulación numérica. Nótese que la ecuación (7e) del problema adjunto constituye una condición final en lugar de una condición inicial. En consecuencia, este problema debe resolverse hacia atrás en el tiempo, partiendo de  $t_f$  hasta llegar a  $t_0$ .

Luego de eliminar los términos que contienen  $\Delta T(\mathbf{x}, t)$ , sólo queda la siguiente expresión integral:

$$\Delta S[q(t)] = \int_{t_0}^{t_f} \lambda(\mathbf{x}, t) \Delta q(t) dt, \quad \mathbf{x} \in \Gamma_R. \quad (8)$$

Basado en la hipótesis que la función desconocida  $q(t) \in L_2[0, t_f]$ , la expresión del incremento  $\Delta S[q(t)]$  tiene la siguiente forma:

$$\Delta S[q(t)] = \int_{t_0}^{t_f} \nabla S[q(t)] \Delta q(t) dt. \quad (9)$$

Comparando (8) y (9), la expresión para computar el gradiente de la función  $S[q(t)]$  es

$$\nabla S[q(t)] = \lambda(\mathbf{x}, t), \quad \mathbf{x} \in \Gamma_R. \quad (10)$$

## 4.2. Proceso iterativo

La función desconocida  $q(t)$  se obtiene a través de un procedimiento de minimización basado en gradiente de la función  $S[q(t)]$ , el cual involucra un proceso iterativo dado por  $q_{k+1}(t) = q_k(t) + \beta_k d_k(t)$ , donde  $\beta_k$  es el tamaño del paso de búsqueda,  $d_k(t)$  la dirección de descenso, y  $k$  la iteración considerada. De esta manera, el éxito del proceso iterativo depende de la selección adecuada de las cantidades  $\beta_k$  y  $d_k(t)$ . Por una parte, el cómputo de  $\beta_k$  se realiza minimizando la función objetivo original  $S[q_{k+1}(t)]$  con respecto a  $\beta_k$ . Se demuestra (Ozisik et al., 2002) que la expresión correspondiente puede ser escrita como:

$$\beta_k = \frac{\int_{t_0}^{t_f} \{T(\mathbf{x}_s, t, q_k(t)) - Y(t)\} \Delta T(\mathbf{x}_s, t, d_k(t)) dt}{\int_{t_0}^{t_f} [\Delta T(\mathbf{x}_s, t, d_k(t))]^2 dt}, \quad (11)$$

tomando  $\Delta q(t) \equiv d_k(t)$  para computar el problema de sensibilidad en cada paso. Por otra parte, la dirección de descenso  $d(t)$  se obtiene mediante un esquema iterativo cuasi-Newton idéntico al empleado por Tourn et al. (2021), definido como  $d_{k+1}(t) = -B_{k+1} \nabla S_{k+1}$ , donde  $B_{k+1}$  es la matriz que aproxima al Hessiano  $\nabla^2 S_{k+1}$ , el cual es actualizado en cada iteración utilizando una fórmula de rango bajo. La elección de dicha matriz permite satisfacer la condición secante  $(B_{k+1})^{-1} s_k = y_k$ , siendo  $y_k = \nabla S_k - \nabla S_{k-1}$  y  $s_k = \beta_k d_k$ . Utilizaremos la expresión de Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno (ó BFGS) para la matriz  $B$ , la cual está definida como  $B_{k+1} = (I - s_k y_k^T / \Psi_k) B_k (I - y_k s_k^T / \Psi_k) + s_k s_k^T / \Psi_k$ , donde  $\Psi_k = y_k^T s_k$  y  $I$  es la matriz identidad.

A su vez, definimos un criterio de parada para el proceso iterativo basado en el principio de discrepancia (Ozisik et al., 2002). Dicho criterio establece que  $S[q_k(t)] < \epsilon$ , donde puede elegirse  $\epsilon = \sigma^2 t_f$ . Este criterio asegura una solución suficientemente precisa que cumple  $|T(\mathbf{x}_s, t; q(t)) - Y(t)| \approx \sigma$  para  $t \geq 0$ .

## 4.3. Algoritmo computacional para la implementación secuencial

La implementación secuencial de la metodología basada en gradiente con problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad descrita en las dos secciones precedentes implica la definición de un parámetro entero positivo  $r \ll M$ , el cual coincide con el parámetro de “pasos de tiempo futuro” del método secuencial de Beck (Kim et al., 2003). Se asume que se conocen los valores discretos de la función  $q(t)$  hasta el instante  $t_{m-1}$ , los cuales se almacenan en el vector  $\mathbf{q} = [q^{(1)}, q^{(2)}, \dots, q^{(m-1)}]^T$ . Entonces, el proceso secuencial implica los siguientes pasos (Tourn et al., 2021):

1. Seleccionar el número de pasos de tiempo futuros  $r$ .
2. Definir el dominio de tiempo  $t \in [t_m, t_{m+r-1}]$  correspondiente a la secuencia actual, el cual corresponde a la suposición transitoria  $t_0 \equiv t_m$  y  $t_f \equiv t_{m+r-1}$ . Armar el vector de mediciones discretas  $\mathbf{Y}^r = [Y^{(m)}, Y^{(m+1)}, \dots, Y^{(m+r-1)}]^T$ .
3. Hacer  $k = 0$  y proponer una semilla inicial para el vector de flujos desconocidos, el cual puede escribirse como  $\mathbf{q}_k^r = [q_k^{(m)}, q_k^{(m+1)}, \dots, q_k^{(m+r-1)}]^T$ .
4. Computar numéricamente la temperatura  $\mathbf{T}_k^r = [T_k^{(m)}, T_k^{(m+1)}, \dots, T_k^{(m+r-1)}]^T$  en la posición del sensor  $s$  mediante el MEF definido en la sección 2.2.
5. Computar la función objetivo  $S(\mathbf{h}_k^r)$  con la ecuación (5) utilizando  $\mathbf{T}_k^r$  definido en el paso 4 y  $\mathbf{Y}^r$  del paso 2, y chequear el criterio de parada definido en la sección 4.2. Si se cumple éste último, detener el proceso iterativo e ir al paso 11; sino, continuar e ir al próximo paso.
6. Resolver numéricamente el problema adjunto (7) por medio del MEF utilizando  $\mathbf{q}_k^r$  para obtener  $\lambda^r$  en  $x = 0$ . Luego, computar el gradiente  $\nabla S(\mathbf{q}_k^r)$  con la ecuación (10).
7. Computar la dirección de descenso  $\mathbf{d}_k^r$  utilizando las definiciones de la sección 4.2.
8. Hacer  $\Delta \mathbf{q}_k^r = \mathbf{d}_k^r$  y resolver numéricamente el problema de sensibilidad (4) por el MEF para obtener  $\Delta \mathbf{T}_k^r$  en la ubicación del sensor  $\mathbf{x}_s$ .
9. Computar el tamaño del paso de tiempo  $\beta_k$  con la ecuación (11) utilizando las cantidades  $\mathbf{T}_k^r$  y  $\Delta \mathbf{T}_k^r$  previamente computadas.
10. Computar una nueva estimación  $\mathbf{q}_{k+1}^r$  mediante la fórmula definida en la sección 4.2, incrementar  $k$  en una unidad, y retornar el paso 4.
11. Una vez satisfecho el criterio de parada, retener solamente la primera componente del valor convergido,  $q_k^{(m)} = \mathbf{q}_{\text{conv}}^r(1)$ , y añadirla al final del vector solución que contiene los valores convergidos hasta el instante de tiempo  $t = t_{m-1}$ , dando  $\mathbf{q} = [q^{(1)}, q^{(2)}, \dots, q^{(m-1)}, q^{(m)}]^T$ . Cambiar el paso de tiempo en una unidad haciendo  $t_m \equiv t_m + \Delta t$  y volver al paso 2.
12. Continuar el proceso iterativo hasta que  $m + r - 1 = M$ .

Podemos apreciar que la solución  $q^{(m)}$  para el  $m$ -ésimo paso de tiempo depende solamente de las condiciones hasta el paso  $m-1$  y de las mediciones futuras  $\mathbf{Y}^r = [Y^{(m)}, Y^{(m+1)}, \dots, Y^{(m+r-1)}]^T$ , las cuales dependen a su vez de la elección del parámetro  $r$ . Queda así en evidencia la capacidad de estimación en tiempo cuasi-real del método.

## 5. CASO DE ESTUDIO: TRATAMIENTO TÉRMICO DE AUSTEMPERADO

Para la evaluación del desempeño del método propuesto consideraremos la probeta cilíndrica de  $D = 1/2''$  de diámetro y  $L = 2 1/2''$  de longitud cuyo material es hierro dúctil, idéntica a la analizada en el trabajo de Vázquez-Gómez et al. (2012). La figura 2 muestra la geometría de la probeta y la historia de temperatura  $Y(t)$  medida en  $s$  durante un tratamiento térmico de austemperado, cuyos datos son: temperatura de austenización  $920^\circ\text{C}$ ; temperatura de austemperado  $300^\circ\text{C}$ ; tiempo de austemperado 390 segundos. A su vez, se muestra la malla de elementos finitos empleada para llevar a cabo el análisis numérico, la cual se compone de 500 elementos triangulares lineales. El tamaño de la malla es lo suficientemente pequeño con el fin de evitar respuestas térmicas espurias ante la presencia de gradientes pronunciados. Como regla, al menos un elemento debe quedar comprendido dentro de la profundidad de penetración (Fachinotti et al., 1999).

La formulación del modelo matemático empleada por Vázquez-Gómez et al. (2012) para el problema térmico es una formulación unidimensional axisimétrica, la cual los autores justifican en virtud de que la relación  $L/D = 5$  es lo suficientemente grande para adoptar dicha

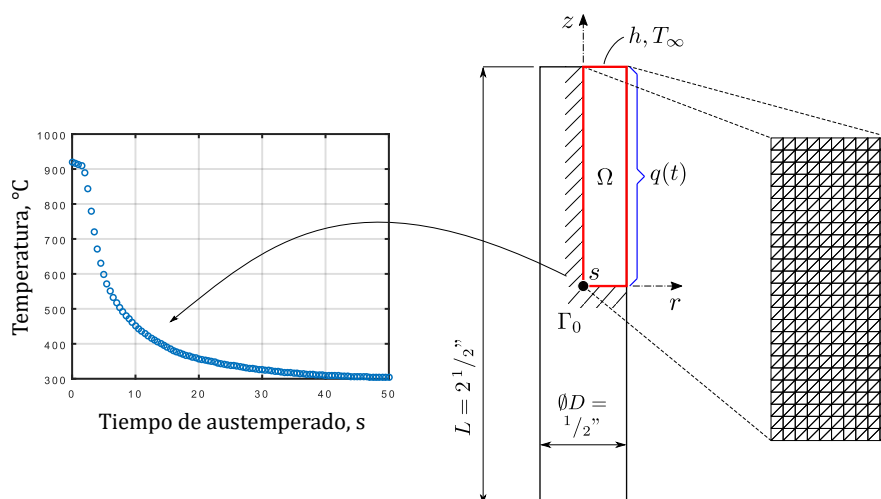


Figura 2: Geometría del problema, malla de elementos finitos, e historia de temperaturas  $Y(t)$  en el punto  $s$  según Vázquez-Gómez et al. (2012).

suposición. Sin embargo, en este trabajo emplearemos una formulación bidimensional como la expuesta en la sección 2, a los fines de caracterizar de manera más completa el fenómeno estudiado. En consecuencia, modelaremos la transferencia de calor a través de la cara circular superior con una condición de borde mixta, donde  $T_\infty$  coincide con la temperatura de austemperado y un coeficiente de convección  $h = 500 \text{ W}/(\text{°C} \cdot \text{m}^2)$ .

Las propiedades termo-físicas en función de la temperatura del hierro dúctil empleado en el estudio son también extraídas del trabajo de Bayati y Elliott (1999). Allí puede apreciarse que el calor específico volumétrico  $\rho c$  corresponde al denominado “calor específico volumétrico efectivo”  $\rho c_{ef}$ , dado que la curva incluye el calor latente del cambio de fase sólido-sólido (el cual se manifiesta en el pico exotérmico durante el enfriamiento). De esta manera, la formulación vía el MEF definida en la sección 2.2 no se ve alterada.

Analizaremos la respuesta obtenida para un conjunto de valores del parámetro de número de pasos de tiempo futuros, a saber:  $r = \{2, 3, 4\}$ . Utilizaremos  $M = 150$  pasos de tiempo para discretizar el dominio temporal  $t \in [0, 50]$ , con lo cual resulta  $\Delta t = 0.3$  segundos. El desempeño del MCNS se evaluará a través de la siguiente fórmula de la raíz cuadrada del error medio cuadrático (RMSE, por sus siglas en inglés):

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M [q_{ex}(t_m) - q_{est}(t_m)]^2}, \quad (12)$$

donde  $q_{ex}(t_m)$  representa el  $m$ -ésimo valor discreto del flujo de calor reportado por Vázquez-Gómez et al. (2012) y  $q_{est}(t_m)$  el correspondiente valor discreto estimado mediante el MCNS.

Por último, evaluaremos la posibilidad de asumir una linealización temporal del problema térmico en el paso N°4 del algoritmo computacional descrito en la sección 4.3 como lo sugiere Beck y Osman (1989), teniendo en cuenta que la duración del problema en el dominio temporal reducido  $[t_m, t_{m+r-1}]$  (definido en el paso N°2) es muy pequeña.

## 6. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

La figura 3 muestra los flujos de calor computados utilizando el MCNS en comparación con el flujo superficial reportado en el trabajo de Vázquez-Gómez et al. (2012), para los casos considerados. En ella se aprecian también los valores del error según la ecuación (12) y los



tiempos empleados por el método propuesto en obtener la solución. Observamos una gran correspondencia entre la curva de referencia y los flujos computados con el presente método para todos los valores del parámetro  $r$ . Al considerar  $r = 2$ , se aprecia una oscilación espuria en el intervalo de tiempo 8-10 segundos, la cual coincide con el rango de temperaturas donde ocurre la no linealidad introducida por el cambio de fase sólido-sólido. Este defecto de la solución se atenúa a medida que incrementamos el valor de  $r$ . A su vez, el pico máximo en el flujo de calor computado se reduce ligeramente. Estos comportamientos están vinculados a la capacidad del parámetro  $r$  para estabilizar (regularizar) el problema inverso a medida que  $r$  aumenta (Beck et al., 1985; Tourn et al., 2021). Los errores en la solución decrecen al incrementarse  $r$ , pero en contrapartida los tiempos de cómputo crecen al considerar intervalos de tiempo secuenciales  $[t_m, t_{m+r-1}]$  más largos. La capacidad de estimación en tiempo cuasi-real del método se aprecia para valores de  $r$  pequeños: por ejemplo, si bien el tiempo de cálculo con  $r = 2$  es  $2 \times$  el tiempo total del análisis transiente, podríamos afirmar que en el intervalo 0-10 segundos, que es donde se produce la mayor parte del fenómeno térmico superficial, la estimación de la solución se encuentra muy próxima a los tiempos de proceso.

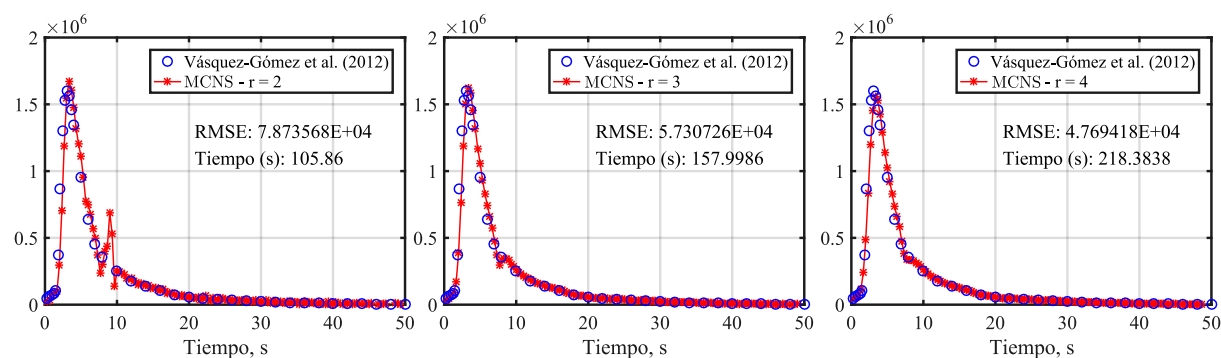


Figura 3: Flujo de calor (en  $W/m^2$ ) obtenido con el MCNS en comparación a la referencia.

Por otra parte, el método propuesto diverge en todos los casos al implementar la linearización temporal en el paso N°4 mencionada en la sección previa. En realidad, el proceso de resolución evoluciona normalmente hasta que las temperaturas en el dominio alcanzan el rango  $367-507^\circ C$ , que es donde se produce el cambio de fase sólido-sólido. A partir de este punto, el algoritmo no es capaz de converger a una solución estable. Este hecho indica que, aún considerando intervalos temporales  $[t_m, t_{m+r-1}]$  extremadamente cortos (como es el caso para  $r = 2$ ), la suposición de linealidad del problema térmico correspondiente no es válida, lo cual es esperable dada la singularidad introducida por el cambio de fase sólido-sólido. Aún así, dicha suposición resulta útil en el caso de problemas ligeramente no lineales (Beck y Osman, 1989; Tourn et al., 2021).

## 7. CONCLUSIONES

En este trabajo, implementamos exitosamente el método cuasi-Newton secuencial para estimar un flujo de calor superficial en una probeta de hierro dúctil sometida a un tratamiento térmico de austemperado. Realizamos las modificaciones necesarias al método ya introducido por Tourn et al. (2021) para resolver problemas térmicos bidimensionales en condiciones geométricas de axisimetría, y en presencia de no linealidades provenientes de dos fuentes principales. Por un lado, la dependencia de las propiedades termo-físicas del hierro dúctil con respecto a la temperatura; y por otro lado, la presencia de un cambio de fase sólido-sólido tenido en cuenta

en la capacidad específica volumétrica efectiva. Los resultados indican que el método desarrollado es robusto y confiable aún en presencia de la pronunciada no linealidad introducida por el cambio de fase. Sin embargo, la necesidad de resolver iterativamente el problema térmico en el paso N°4 del algoritmo secuencial ralentizó la obtención del flujo de calor incógnita, lo cual representa una desventaja dadas las posibilidades de estimación en tiempo cuasi-real característica de esta metodología secuencial. El desarrollo de esta clase de algoritmos de estimación inversa secuencial permite mejorar las capacidades de modelado computacional de los fenómenos de transferencia térmica superficial durante un tratamiento térmico. Esta mayor precisión en la estimación numérica de las condiciones de borde permitiría no sólo mejorar la calidad de las aleaciones obtenidas, sino también diseñar procesos de transferencia térmica superficial óptimos para una geometría en particular.

## REFERENCIAS

- Alifanov O.M. *Inverse heat transfer problems*. Springer Science & Business Media, 2012.
- Bayati H. y Elliott R. Influence of matrix structure on physical properties of an alloyed ductile cast iron. *Materials science and technology*, 15(3):265–277, 1999.
- Beck J. y Osman A. Nonlinear inverse problem for the estimation of time-and-space-dependent heat-transfer coefficients. *Journal of thermophysics and heat transfer*, 3(2):146–152, 1989.
- Beck J.V., Blackwell B., y Clair Jr C.R.S. *Inverse heat conduction: Ill-posed problems*. James Beck, 1985.
- Fachinotti V.D., Cardona A., y Huespe A.E. A fast convergent and accurate temperature model for phase-change heat conduction. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 44(12):1863–1884, 1999.
- Felde I. y Réti T. Evaluation of hardening performance of cooling media by using inverse heat conduction methods and property prediction. *Strojnicki vestnik–Journal of Mechanical Engineering*, 56(2):77–83, 2010.
- Kim S.K., Lee J.S., y Lee W.I. A solution method for a nonlinear three-dimensional inverse heat conduction problem using the sequential gradient method combined with cubic-spline function specification. *Numerical Heat Transfer: Part B: Fundamentals*, 43(1):43–61, 2003.
- Ozisik M.N., Orlande H.R., y Kassab A. Inverse heat transfer: fundamentals and applications. *Appl. Mech. Rev.*, 55(1):B18–B19, 2002.
- Razzaghi H., Kowsary F., y Ashjaee M. Derivation and application of the adjoint method for estimation of both spatially and temporally varying convective heat transfer coefficient. *Applied Thermal Engineering*, 154:63–75, 2019.
- Slodička M., Lesnic D., y Onyango T. Determination of a time-dependent heat transfer coefficient in a nonlinear inverse heat conduction problem. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 18(1):65–81, 2010.
- Tourn B.A., Hostos J.C.Á., y Fachinotti V.D. A modified sequential gradient-based method for the inverse estimation of transient heat transfer coefficients in non-linear one-dimensional heat conduction problems. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 127:105488, 2021.
- Vázquez-Gómez O., Barrera-Godínez J., Hernández-Morales B., Vergara-Hernández H., y López-Martínez E. Mathematical model of thermal and microstructural evolution during austempering of ductile iron. *Materials Performance and Characterization*, 1(1):1–14, 2012.