

PREDICCIÓN DE PROPIEDADES TÉRMICAS DE ACEROS MICROALEADOS EXPERIMENTALES DE ALTA RESISTENCIA MEDIANTE EL USO DE REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Edgar López Martínez^{1*}, *Jan Mayén*², *Sergio Serna*², *Oswaldo Flores*³, *Bernardo Campillo*^{1,3}

1: Facultad de Química-Universidad Nacional Autónoma de México. Cd. Universitaria, D.F., México.

2: CIICAp-Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca, Morelos, México.

3: Instituto de Ciencias Físicas-Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos, México.

* Contacto: edgar0902@comunidad.unam.mx

RESUMEN

Se propuso la implementación de dos redes neuronales artificiales (RNA's) como herramientas para estimar o predecir la conductividad térmica y capacidad calorífica en función de la composición química y temperatura de tres aceros microaleados experimentales de alta resistencia. Las RNA's fueron entrenadas con información obtenida de la literatura, y probadas en aceros que no fueron utilizados para el entrenamiento, pero que si se conocían sus propiedades. Se observó una buena aproximación entre las propiedades reales y las estimadas.

Palabras Clave: *Aceros microaleados de alta resistencia, Conductividad térmica, Capacidad calorífica, Redes neuronales artificiales*

ABSTRACT

The implementation of two artificial neural networks (ANN's) was proposed as a tool to estimate or predict the heat capacity and thermal conductivity as function of the chemical composition and temperature of three experimental high strength microalloyed steels. The ANN's were trained with information obtained from the literature, and tested in steels that were not used during the training, but with known thermal properties. It was observed a good approximation between real and estimated properties.

Keywords: *High strength microalloyed steels, Thermal conductivity, Heat capacity, Artificial neural networks*

1 INTRODUCCIÓN

Para una adecuada manufactura de componentes metalúrgicos fabricados de acero, es necesario conocer sus propiedades térmicas, y en muchos casos, cómo cambian estas propiedades con la temperatura. Por ejemplo, en procesos tales como soldadura y tratamientos térmicos de los aceros, se requiere conocer la conductividad térmica y la capacidad calorífica para el adecuado diseño, simulación y análisis de los ciclos de enfriamiento y calentamiento; ya que de esto dependerán las microestructuras desarrolladas, y por consiguiente las propiedades mecánicas que se obtendrán. La determinación de las propiedades térmicas se hace mediante técnicas de

calorimetría diferencial de barrido [1], por métodos inversos [2] e indirectamente mediante la determinación de la difusividad térmica [3]. En la actualidad, se están desarrollando nuevos aceros microaleados con tratamientos termomecánicos, por lo que para procesarlos, es necesario caracterizarlos térmicamente, ya que las propiedades térmicas son función de la composición química y la temperatura (Figura 1). En el caso de la conductividad térmica, se observa un mayor efecto de la composición química a bajas temperaturas, resultando mayor para aceros con mayor contenido de elementos aleantes. Para la capacidad calorífica, los elementos aleantes pueden disminuir o a aumentar esta propiedad, a temperaturas superiores a 200°C. En base a esto, el objetivo de nuestro trabajo fue estimar o predecir la conductividad térmica y capacidad calorífica en función de la temperatura de tres aceros microaleados experimentales de alta resistencia. Debido a que la aplicación de RNA's ha demostrado ser una herramienta poderosa en la predicción de parámetros, simulación y solución de problemas de aplicaciones ingenieriles [4], se decidió el diseño de dos RNA's; una para predecir la conductividad térmica y otra para predecir la capacidad calorífica. Las variables o parámetros de entrada en ambas RNA's fueron la composición química y temperatura, y las variables o parámetros de salida fueron la conductividad térmica y la capacidad calorífica. La composición de los tres aceros experimentales se muestra en la Tabla 1.

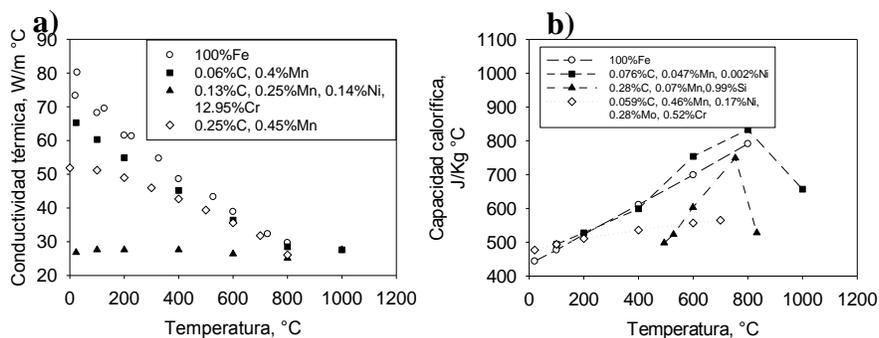


Figura 1. a) Conductividad térmica y **b)** capacidad calorífica, en función de la temperatura para diferentes aceros

Tabla 1. Composición química de los tres aceros microaleados experimentales de alta resistencia

Acero	%C	%Si	%Mn	%Cr	%Mo	%Ni	%Al	%Co	%Cu	%Nb	%Ti
A	0.03	0.24	1.00	0.42	0.18	1.35	0.05	0.01	0.01	0.02	0.02
B	0.03	0.24	1.04	0.43	0.17	1.33	0.05	0.01	0.01	0.02	0.02
B2	0.03	0.24	1.03	0.42	0.17	1.30	0.05	0.01	0.01	0.02	0.02

2 DISEÑO DE LAS REDES NEURONALES ARTIFICIALES

Una RNA, es un modelo matemático, el cual está inspirado en redes neuronales biológicas. La unidad de una RNA es un procesador elemental llamado neurona, que tiene la capacidad de contar una suma ponderada de sus entradas, y luego aplicar una función para obtener una señal que es transmitida a otra neurona. A través de un algoritmo de aprendizaje, las RNA's ajustan su arquitectura y parámetros de manera de poder minimizar alguna función de error que indique el grado de ajuste a los datos. En este trabajo, se propuso el diseño de dos RNA's del tipo perceptón multicapa con una regla de aprendizaje de propagación hacia atrás y función de transferencia

sigmoïdal. La primer RNA se diseñ6 para predecir la conductividad t6rmica, y la segunda para predecir la capacidad calorífica. Para entrenar a las RNA's se obtuvieron dos bases de datos de la literatura. Se tuvo cuidado de obtener la suficiente informaci6n como para asegurar que la composici6n qu6mica de nuestros aceros microaleados, estuviera dentro de los l6mites de las composiciones de los aceros recopilados. La Tabla 2 muestra los valores m6nimos y m6ximos de las variables de entrada (composici6n qu6mica y temperatura) y de salida (conductividad t6rmica y capacidad calorífica) para el entrenamiento de las RNA's. En la RNA para estimar la conductividad t6rmica, se utiliz6 un total de 15 variables de entrada (14 para la composici6n qu6mica y 1 para la temperatura), y en la RNA para estimar la capacidad calorífica se utiliz6 un total de 13 variables de entrada (12 para la composici6n qu6mica y 1 para la temperatura). En ambas RNA's, se utiliz6 una sola capa oculta con ocho neuronas cada una. La Figura 2 muestra la arquitectura de las RNA's diseñadas. Las RNA's se probaron con el uso de aceros que no fueron utilizados durante el entrenamiento, pero con propiedades t6rmicas conocidas.

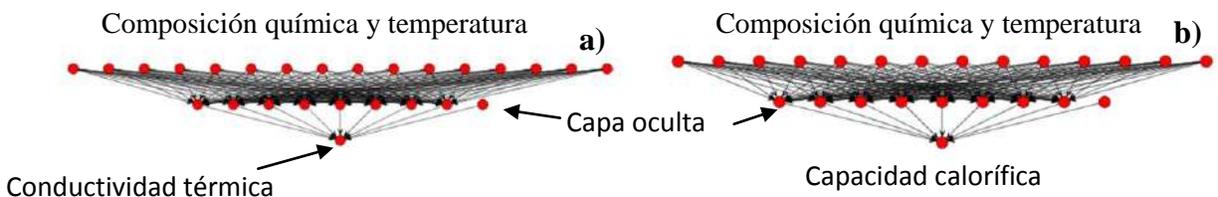


Figura 2. Arquitectura de las RNA's; a) para predecir la conductividad t6rmica; b) para predecir la capacidad calorífica

Tabla 2. Valores m6ximos y m6nimos de las variables de entrada y salida de las RNA's. a) Variables para la RNA de la conductividad t6rmica; b) Variables para la RNA de la capacidad calorífica

a)			b)		
Variable	M6nimo	M6ximo	Variable	M6nimo	M6ximo
%Fe	16.16	100.00	%Fe	21.00	100.00
%C	0.00	1.70	%C	0.00	1.70
%Mn	0.00	6.00	%Mn	0.00	13.00
%Ni	0.00	63.00	%Ni	0.00	60.00
%Mo	0.00	4.80	%Mo	0.00	3.600
%V	0.00	3.00	%Cr	0.00	29.00
%Cr	0.00	30.40	%Cu	0.00	0.64
%Cu	0.00	0.64	%Al	0.00	4.50
%Al	0.00	4.50	%Nb	0.00	0.90
%Nb	0.00	3.00	%Si	0.00	2.00
%Si	0.00	3.50	%W	0.00	18.5
%W	0.00	18.50	%Ti	0.00	0.60
%Ti	0.00	1.40	Temperatura, °C	20.00	1000
%Co	0.00	46.60	Cp, J/Kg°C		
Temperatura, °C	0.00	1200			
Conductividad t6rmica, W/m°C	10.9	80.2			

El diseño y aplicaci6n de las RNA's se llev6 a cabo mediante el uso del software de acceso libre Neuroph 2.7.

3 RESULTADOS

La Figura 3 muestra la comparación entre la conductividad térmica y la capacidad calorífica reales o reportadas en la literatura y las estimadas mediante el uso de las RNA's diseñadas. En la figura se graficaron todos los datos estimados durante el entrenamiento. Los coeficientes de correlación lineal que se obtienen de estas comparaciones es igual a 0.94 y 0.95 para la conductividad térmica y capacidad calorífica respectivamente, lo que es una medida de la eficiencia de las RNA's. En el caso de la conductividad térmica, se observa que a valores superiores a 60 W/m°C se presenta una subestimación de la propiedad, pero debajo de este valor, la mayor parte de los valores estimados se aproximan a los reales. Para el caso de la capacidad calorífica, se observa que a valores mayores a 800J/Kg°C, también existe una subestimación. En la Figura 4 y Figura 5 se muestran los resultados de la fase de prueba de la RNA's para predecir la conductividad térmica y capacidad calorífica respectivamente, de aceros con composiciones químicas diferentes. Aunque estos aceros no fueron incluidos en la fase de entrenamiento, se observa una buena aproximación entre los resultados estimados y los reales. En la Figura 5a) se observa que a pesar de que la capacidad calorífica real presenta un "pico" alrededor de los 600°C, este pico puede ser estimado por la RNA con una muy buena aproximación, y aunque no se presente éste comportamiento, de cualquier modo se obtiene una buena aproximación (Figura 5b)). Una vez que las RNA's fueron probadas con aceros que no estuvieron incluidos en la fase de entrenamiento, se realizaron predicciones de las propiedades térmicas de los aceros microaleados experimentales bajo estudio (Figura 6), en donde las variables de entrada fueron la composición química (Tabla 1) y el rango de temperatura de 20 a 1200°C. De los resultados de las estimaciones con las RNA's, se puede observar que para los tres aceros se tiene casi los mismos valores de conductividad térmica y capacidad calorífica, esto porque las composiciones químicas son muy parecidas. La capacidad calorífica se ve poco afectada por la composición química, es decir, se parece a la capacidad del hierro puro (Figura 1). Adicionalmente, se observa un pico de 790J/Kg°C alrededor de los 800°C, con una subsiguiente disminución a un valor de 400J/Kg°C a 1000°C. Por otro lado, a bajas temperaturas la conductividad térmica si se ve afectada por la composición química, en donde en el rango de 20 a 600°C se observa una disminución de la magnitud en comparación con el hierro puro (Figura 1), pero a temperaturas mayores no se observa una diferencia apreciable.

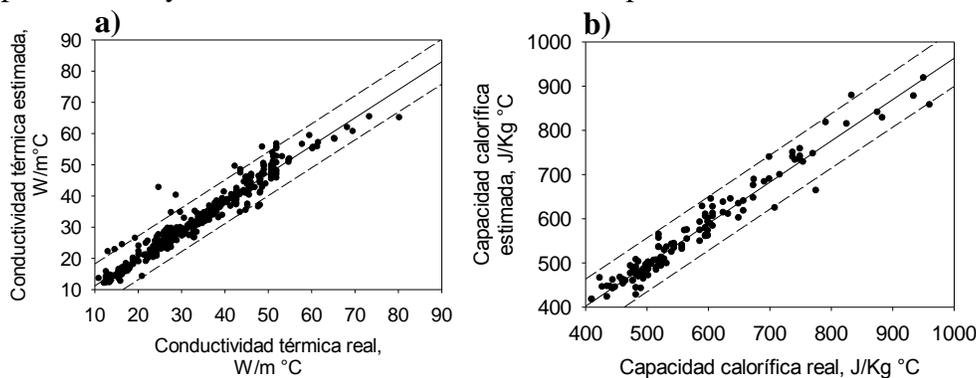


Figura 3. Conductividad térmica y capacidad calorífica en función de la temperatura para diferentes aceros. **a)** Conductividad térmica, **b)** Capacidad calorífica

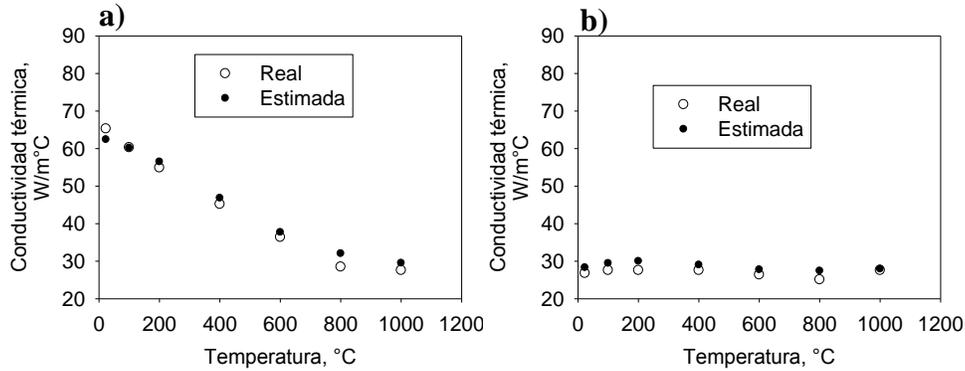


Figura 4. Comparación de la conductividad térmica real y estimada mediante el uso de la RNA para dos aceros diferentes. **a)** 0.06% C, 0.4% Mn; **b)** 0.13% C, 0.25% Mn, 0.14% Ni, 12.95% Cr

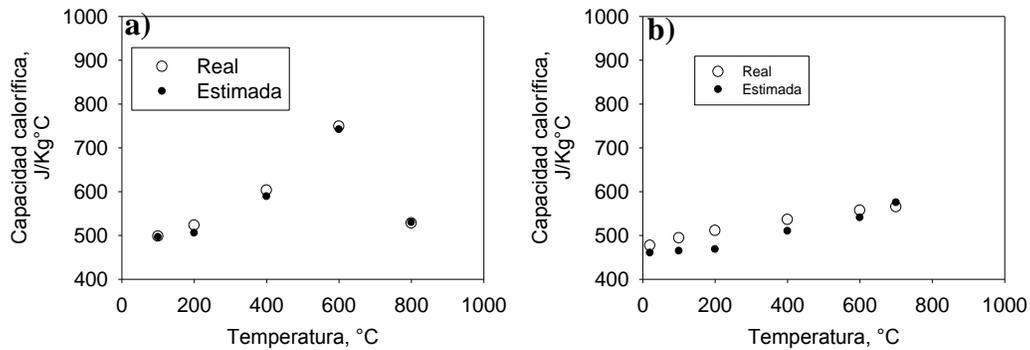


Figura 5. Comparación de la capacidad térmica real y estimada mediante el uso de la RNA para dos aceros diferentes. **a)** 0.28% C, 0.07% Mn, 0.99% Si, **b)** 0.059% C, 0.46% Mn, 0.17% Ni, 0.28% Mo, 0.52% Cr

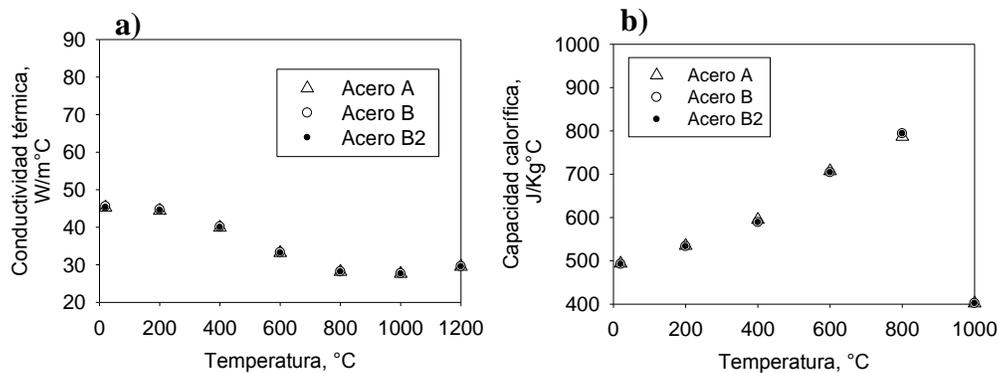


Figura 6. Resultados estimados de **a)** Conductividad térmica, y **b)** capacidad calorífica, mediante el uso de dos RNA's

4 CONCLUSIONES

Se diseñaron, entrenaron y probaron dos RNA's para predecir la conductividad térmica y capacidad calorífica de aceros en función de la composición química y la temperatura. Los coeficientes de correlación lineal que se obtienen de la comparación entre valores reales y estimados son de 0.94 y 0.95 para la conductividad térmica y la capacidad calorífica respectivamente.

Mediante la prueba de las redes, se observó que estas RNA's son capaces de predecir las propiedades térmicas de cualquier acero que este dentro de los límites de composición química y temperatura.

Una vez probadas la RNA's, se utilizaron para predecir las propiedades térmicas de aceros microaleados experimentales de alta resistencia. Con esta información, se podrá realizar el diseño y análisis de procesos donde se involucre fenómenos de transferencia de calor.

5 AGRADECIMIENTOS

Los autores agradecemos al Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica a través del proyecto IG101313 de la Universidad Nacional Autónoma de México, y al Concejo Nacional de Ciencia y Tecnología a través del proyecto de ciencia básica 178777 por el apoyo financiero otorgado; así como a I. Puente-Lee de la Facultad de Química-UNAM.

6 REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Raju, S., Jeya Ganesh, B., Kumar Rai, A., Mythili, R., Saroja, S., Mohandas, E., Vijayalakshmi, M., Rao, K.B.S. y Raj, B., "Measurement of transformation temperatures and specific heat capacity of tungsten added reduced activation ferritic-martensitic steel", *Journal of Nuclear Materials*, Vol. 389, No. 3, 385-393, 2009.
2. Telejko, T, "Analysis of an inverse method of simultaneous determination of thermal conductivity and heat of phase transformation in steels", *Journal of Materials Processing Technology*, Vols. 155-156, 1317-1323, 2004.
3. Peña-Rodríguez, G., Calderón, A. y Muñoz Hernández R.A., "Determinación experimental de la difusividad térmica en acero API5L-X52", *Superficies y Vacío*, Vol. 16, No. 2, 1-3, 2003.
4. Rey-Chue, H., Yu-Ju, C. y Huang-Chu, H., "Artificial intelligent analyzer for mechanical properties of rolled steel bar by using neural networks", *Expert Systems with Applications*, Vol. 37, No. 4, 3136-3139, 2010.