

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL



DOCTORADO EN INGENIERÍA

# **Desarrollo de herramientas computacionales para el control de procesos en la obtención de hierro dúctil austemperado**

Benjamin A. Tourn

FICH

FACULTAD DE INGENIERÍA Y CIENCIAS HÍDRICAS

INTEC

INSTITUTO DE DESARROLLO TECNOLÓGICO PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA

CIMEC

CENTRO DE INVESTIGACIÓN DE MÉTODOS COMPUTACIONALES

*sinc(i)*

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN EN SEÑALES, SISTEMAS E INTELIGENCIA

COMPUTACIONAL

Tesis de Doctorado **2021**





**Doctorado en Ingeniería**  
**mención Mecánica Computacional**

Título de la obra:

**Desarrollo de herramientas  
computacionales para el control  
de procesos en la obtención de  
hierro dúctil austemperado**

Autor: Benjamin Alfredo Tourn

Lugar: Santa Fe, Argentina

Palabras Claves:

Hierro dúctil austemperado, ADI

Problema inverso de conducción de calor, IHCP

Método de elementos finitos

Optimización

Método de gradiente conjugado

Método cuasi-Newton secuencial

Variación total



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigaciones en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

# **Desarrollo de herramientas computacionales para el control de procesos en la obtención de hierro dúctil austemperado**

**Benjamin A. Tourn**

Tesis remitida al Comité Académico del Doctorado  
como parte de los requisitos para la obtención

del grado de

**DOCTOR EN INGENIERÍA**

Mención Mecánica Computacional

de la

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

**2021**

Comisión de Posgrado, Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas, Ciudad Universitaria,  
Paraje "El Pozo", S3000, Santa Fe, Argentina.





UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Instituto de Desarrollo Tecnológico para la Industria Química

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Instituto de Investigaciones en Señales, Sistemas e Inteligencia Computacional

## **Desarrollo de herramientas computacionales para el control de procesos en la obtención de hierro dúctil austemperado**

**Benjamin A. Tourn**

### **Lugar de trabajo:**

CIMEC

Centro de Investigación de Métodos Computacionales

Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas

Universidad Nacional del Litoral

### **Director:**

Dr. Víctor D. Fachinotti      CONICET-CIMEC / Universidad Nacional del Litoral

### **Co-director:**

Dr. Ignacio Rintoul      CONICET-INTEC / Universidad Nacional del Litoral

### **Jurado Evaluador:**

Dr. Diego Celentano

PUC-Chile

Dra. Patricia Dardati

FRC-UTN

Dr. Javier Signorelli

FCEIA-UNR

**2021**







## ACTA DE EVALUACIÓN DE TESIS DE DOCTORADO

En la sede de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas de la Universidad Nacional del Litoral, a los seis días del mes de diciembre del año dos mil veintiuno, se reúnen en forma virtual los miembros del Jurado designado para la evaluación de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada "*Desarrollo de herramientas computacionales para el control de procesos en la obtención de hierro dúctil austemperado*", desarrollada por el Ing. Benjamín Alfredo TOURN, DNI N° 32.056.385. Ellos son: Dr. Diego Celentano, Dra. Patricia Dardati y Dr. Javier Signorelli.-----

La Presentación oral y defensa de la Tesis se efectúa bajo la modalidad virtual según lo establecido por resolución de Rector N° 529/20 y resolución del Consejo Directivo N° 015/20.

Luego de escuchar la Defensa Pública y de evaluar la Tesis, el Jurado resuelve:

La presentación fue muy clara y organizada, así como el documento de tesis presentado, en ambos se señalaron los aportes y contribuciones originales realizados.

Así mismo, el tesista respondió con solvencia las preguntas del jurado.

Los resultados alcanzados han sido notablemente superiores a los del estado del arte y se han comunicado en publicaciones reconocidas internacionalmente y de buen factor de impacto.

La metodología propuesta es promisoría en el sentido que puede ser de aplicación en la práctica industrial.

Por lo tanto, el jurado aprueba la tesis con calificación 10 (Diez) Sobresaliente.

Sin más, se da por finalizado el Acto Académico con la firma de los miembros del Jurado al pie de la presente. -----

-----  
Dr. Diego Celentano

-----  
Dra. Patricia Dardati

-----  
Dr. Javier Signorelli



*Macor*  
Dr. JOSÉ LUIS MACOR  
SECRETARIO DE POSGRADO  
Facultad de Ingeniería y Cs. Hídricas

Universidad Nacional del Litoral  
Facultad de Ingeniería y  
Ciencias Hídricas  
  
Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria  
C.C. 217  
Ruta Nacional N° 168 - Km. 472,4  
(3000) Santa Fe  
Tel: (54) (0342) 4575 229  
Fax: (54) (0342) 4575 224  
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar



**UNIVERSIDAD NACIONAL DEL LITORAL**  
**Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas**

Santa Fe, 6 de Diciembre de 2021.

Como miembros del Jurado Evaluador de la Tesis de Doctorado en Ingeniería titulada *“Desarrollo de herramientas computacionales para el control de procesos en la obtención de hierro dúctil austemperado”*, desarrollada por el Ing. Benjamín Alfredo TOURN, en el marco de la Mención “Mecánica Computacional”, certificamos que hemos evaluado la Tesis y recomendamos que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.

La aprobación final de esta disertación estará condicionada a la presentación de dos copias encuadernadas de la versión final de la Tesis ante el Comité Académico del Doctorado en Ingeniería.

-----  
Dr. Diego Celentano

-----  
Dra. Patricia Dardati

-----  
Dr. Javier Signorelli

Santa Fe, 6 de Diciembre de 2021.

Certifico haber leído la Tesis, preparada bajo mi dirección en el marco de la Mención “Mecánica Computacional” y recomiendo que sea aceptada como parte de los requisitos para la obtención del título de Doctor en Ingeniería.

.....  
Dr. Ignacio Rintoul  
Codirector de Tesis

.....  
Dr. Víctor Fachinotti  
Director de Tesis



**Universidad Nacional del Litoral**  
Facultad de Ingeniería y  
Ciencias Hídricas  
  
Secretaría de Posgrado

Ciudad Universitaria  
C.C. 217  
Ruta Nacional N° 168 - Km. 472,4  
(3000) Santa Fe  
Tel: (54) (0342) 4575 229  
Fax: (54) (0342) 4575 224  
E-mail: posgrado@fich.unl.edu.ar

# Declaración legal del autor

Esta Tesis ha sido remitida como parte de los requisitos para la obtención del grado de Doctor ante la Universidad Nacional del Litoral y ha sido depositada en la Biblioteca de la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas para que esté disponible a sus lectores bajo las condiciones estipuladas por el Reglamento de la mencionada Biblioteca.

Citaciones breves de esta disertación son permitidas sin la necesidad de un permiso especial, en la suposición de que la fuente sea correctamente citada. Solicitudes de permiso para una citación extendida o para la reproducción de este manuscrito en un todo o en parte serán exigidas por el portador legal del derecho de propiedad intelectual de la misma.

Algunas de las partes del presente trabajo fueron publicadas en las revistas *International Communications in Heat and Mass Transfer* y *Numerical Heat Transfer, Part A*.

Benjamin A. Tourn



# Agradecimientos

En primer lugar, quiero agradecer a las instituciones que hicieron posible la realización de la presente Tesis: el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET), que financió mi beca de estudio de doctorado; la Facultad de Ingeniería y Ciencias Hídricas (FICH-UNL), donde he realizado el doctorado; y al Centro de Investigación de Métodos Computacionales (CIMEC), que me brindó un lugar de trabajo entre 2014 y 2018.

Deseo expresar mi profundo agradecimiento a mi director y co-director de Tesis, el Dr. Victor Fachinotti y el Dr. Ignacio Rintoul respectivamente, por su apoyo y su guía durante el desarrollo de la Tesis. También, al Dr. Juan Carlos Álvarez Hostos, quien me brindó su estrecha colaboración en la elaboración de las publicaciones que se desprenden de esta Tesis con la mayor celeridad, calidad y compromiso alcanzables. La concreción de esta Tesis fue, en buena medida, producto de su aporte.

También, deseo enfatizar en este párrafo mi agradecimiento a la Universidad Nacional de Rafaela (UNRaf), que me brindó financiación y lugar de trabajo entre 2020 y 2021; y particularmente al vicedirector del Centro de Investigación y Transferencia (CIT) Rafaela, el Dr. Luis Silva, quien realizó las gestiones necesarias para lograr mi incorporación a dicho centro.

No quiero dejar de agradecer a mis ex-compañeros de oficina de CIMEC, con quienes compartimos a lo largo de mis años de estadía allí variadas experiencias, conversaciones, discusiones, frustraciones, y alegrías, sin dejar de mencionar mi profundo respeto y admiración por su dedicación, convicción, y compromiso con sus trabajos. Hago extensivo tal reconocimiento a demás compañeros becarios, como también a investigadores, personal de apoyo y personal administrativo.

Deseo agradecer también a mi madre y a mi familia política por su apoyo.

Finalmente, deseo dedicar íntegramente este párrafo para agradecer especialmente a mi amada esposa Ayelén. Su apoyo constante e incondicional y su sostén anímico y afectivo a lo largo de todos los años dedicados a este fin, especialmente en momentos difíciles y de gran incertidumbre, fue fundamental para lograr el cometido.



# Resumen

El austemperado es un tratamiento térmico que produce una mejora sustancial de las propiedades mecánicas de una pieza de hierro dúctil, tales como su resistencia al impacto y la abrasión, resistencia mecánica, dureza y tenacidad. La microestructura final obtenida en el seno de la pieza luego del proceso de austemperado es responsable de tal mejora. En consecuencia, el material resultante es conocido como hierro dúctil austemperado (ADI, por sus siglas en inglés). La mayoría de los estudios llevados a cabo en relación al ADI han focalizado su atención en los complejos mecanismos que gobiernan la transformación metalográfica que ocurre durante el tratamiento térmico, su inter-dependencia, y su relación con variables del proceso industrial propiamente dicho.

En esta Tesis se presenta una estrategia que permite la caracterización, monitoreo y control de parte del proceso industrial de obtención de ADI, basada en el empleo de métodos inversos discretos. Estos posibilitan el estudio de los fenómenos de transferencia de calor superficial que ocurren en la frontera exterior de una pieza, particularmente durante la etapa de enfriamiento del tratamiento térmico, la cual resulta ser una de las fases de mayor criticidad en la obtención de ADI.

Los métodos inversos aquí considerados consisten en resolver un problema inverso de conducción de calor (IHCP, por sus siglas en inglés), partiendo de temperaturas conocidas en el interior de cuerpo para obtener las correspondientes condiciones de borde. Debido a la mala colocación característica de esta clase de problemas, resulta imprescindible el uso de estrategias de regularización apropiadas que estabilicen la solución obtenida. En este sentido, las principales contribuciones de esta Tesis se enfocan en el desarrollo de herramientas computacionales para determinar las condiciones de borde transientes, de flujo o de convección al medio exterior, del problema térmico en una o dos dimensiones, ya sea éste lineal o no lineal.

La principal conclusión de esta Tesis, derivada de la aplicación de los métodos propuestos en el estudio de los fenómenos térmicos superficiales que ocurren en una pieza durante la etapa de enfriamiento del tratamiento térmico de austemperado, es que los métodos inversos térmicos resultan adecuados para lograr el objetivo propuesto en geometrías simples como probetas cilíndricas. Futuros trabajos abordarán la extensión de los métodos desarrollados para resolver IHCPs en geometrías más complejas.





# Abstract

Austempering is a heat treatment procedure that yields a substantial improvement of the mechanical properties of a ductile iron part, such as its wear and impact resistance, mechanical strength, hardness, and toughness. The final microstructure obtained within the part after the austempering process is responsible for such an improvement. Henceforth, the resulting material is known as austempered ductile iron (ADI). The bulk of research related to ADI has been focused in the complex mechanisms, and its cross-dependencies, governing the microstructural and metallographic transformations that occurs during the heat treatment, and its relationship with variables from the industrial process itself.

In this Thesis, a complementary strategy is presented which allows the characterization, monitoring and controlling part of the austempering industrial process. Such a strategy, based in the use of discrete inverse methods, makes possible the study of the surface heat transfer phenomena that occurs at the boundary of a part, particularly during the cooling stage of the heat treatment, which is one of the more critical phase for obtaining ADI.

The inverse methods considered here consist in solving an inverse heat conduction problem (IHCP) to obtain the boundary conditions, starting from temperature measurements obtained at a prescribed location within the body. Since this kind of problems are mathematically characterized by its ill-posedness, it is essential using appropriate regularization strategies for stabilizing the obtained solution. In this sense, the main contributions of this work are focused in the development of computational tools for determining the transient boundary conditions of the thermal problem, involving flux or convection to the outer medium, both in linear and non-linear problems in one- or two-dimensional settings.

The main output from this Thesis, resulting from the application of the proposed inverse methods for the study of surface thermal phenomena that takes place in a part during the cooling stage of the austempering heat treatment, is that inverse methods are adequate to fulfill the proposed objective in simple geometries such as cylindrical probes. Future works will address the extension of the developed methods for solving IHCPs in more complex geometries.



# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación . . . . .	1
1.1.1. Contexto regional y nacional . . . . .	1
1.1.2. Proceso de obtención de ADI y características principales del material . .	4
1.1.3. Desafíos en la obtención de ADI . . . . .	8
1.2. Herramientas computacionales para ADI . . . . .	9
1.3. Hipótesis planteada . . . . .	11
1.4. Objetivos . . . . .	12
1.4.1. Objetivo general . . . . .	12
1.4.2. Objetivos particulares . . . . .	12
1.5. Estructura de la Tesis . . . . .	13
<b>2. Problema térmico inverso de conducción de calor</b>	<b>15</b>
2.1. Introducción . . . . .	15
2.2. Estudio de las dificultades en la resolución del IHCP . . . . .	17
2.2.1. Amortiguamiento y retraso . . . . .	18
2.2.2. Inestabilidad frente a errores en las mediciones . . . . .	19
2.3. Modelo matemático del problema inverso . . . . .	20
2.3.1. Herramientas analíticas . . . . .	21
2.3.2. Planteo discreto . . . . .	23
2.4. Detalles del modelo matemático en problemas térmicos . . . . .	27
2.4.1. Teorema de Duhamel . . . . .	28
2.4.2. Expresión discreta . . . . .	29
2.4.3. Coeficientes de sensibilidad . . . . .	30
2.4.4. Planteo discreto del problema térmico inverso . . . . .	31
2.5. Regularización . . . . .	32
2.6. Estrategias de regularización en el enfoque discreto . . . . .	33

2.6.1.	Regularización por filtrado . . . . .	35
2.6.2.	Regularización por métodos variacionales . . . . .	36
2.6.3.	Regularización por métodos iterativos . . . . .	38
2.6.4.	Regularización por pasos de tiempo futuros . . . . .	39
2.7.	Problemas inversos no lineales . . . . .	39
2.8.	Sumario . . . . .	40
<b>3.</b>	<b>Implementación de un método inverso secuencial</b>	<b>43</b>
3.1.	Introducción . . . . .	43
3.2.	Solución numérica del problema térmico . . . . .	44
3.3.	Método de Beck . . . . .	47
3.4.	Método de gradiente conjugado secuencial . . . . .	51
3.4.1.	CGM con problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad . . . . .	53
3.4.2.	Versión secuencial . . . . .	58
3.5.	Método cuasi-Newton secuencial . . . . .	59
3.6.	Conclusiones . . . . .	61
<b>4.</b>	<b>Caso de estudio</b>	<b>63</b>
4.1.	Introducción . . . . .	63
4.2.	Problema térmico directo . . . . .	64
4.3.	Problema térmico inverso de conducción de calor . . . . .	65
4.4.	Caso de estudio . . . . .	66
4.5.	Resultados y discusión . . . . .	67
4.5.1.	Caracterización de la curva de ebullición . . . . .	68
4.6.	Conclusiones . . . . .	70
<b>5.</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>71</b>
5.1.	Publicaciones científicas . . . . .	72
5.1.1.	Publicaciones en revistas internacionales con referato . . . . .	73
5.1.2.	Publicaciones y presentaciones en congresos . . . . .	73
<b>6.</b>	<b>Trabajos futuros</b>	<b>75</b>
<b>A.</b>	<b>A modified sequential gradient-based method for the inverse estimation of transient heat transfer coefficients in non-linear one-dimensional heat conduction problems</b>	<b>91</b>
1.	Introduction . . . . .	94
2.	Formulation of the inverse problem . . . . .	96

2.1.	Governing equations . . . . .	96
2.2.	Finite element-based solution of the inverse problem . . . . .	97
3.	Sequential quasi-Newton method . . . . .	99
3.1.	Objective function . . . . .	99
3.2.	The sensitivity problem . . . . .	99
3.3.	The adjoint problem . . . . .	100
3.4.	The gradient equation . . . . .	101
3.5.	The iterative procedure . . . . .	101
3.6.	The sequential implementation . . . . .	103
3.7.	The stopping criterion . . . . .	103
3.8.	The solution algorithm . . . . .	104
4.	Numerical examples and results . . . . .	105
5.	Discussion . . . . .	108
5.1.	Influence of sensor placement . . . . .	110
5.2.	Extending the SQNM beyond one-dimensional problems . . . . .	113
6.	Conclusions . . . . .	118

**B. Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear Inverse Heat Conduction Problems concerning the estimation of surface heat fluxes** **123**

1.	Introduction . . . . .	126
2.	Formulation of the inverse problem . . . . .	128
2.1.	Governing equations . . . . .	128
2.2.	Finite element implementation . . . . .	129
2.3.	Objective function . . . . .	130
2.4.	Sensitivity analysis . . . . .	130
2.5.	Typical solution strategy for the linear inverse model . . . . .	131
2.6.	Selection of the regularization parameter $\alpha$ . . . . .	132
3.	The $\ell_2$ -TV problem . . . . .	132
3.1.	Formulation of the problem . . . . .	132
3.2.	Discrete implementation of the TV term . . . . .	133
3.3.	Solution strategies for the $\ell_2$ -TV problem . . . . .	134
3.4.	Choosing the regularization parameter in the $\ell_2$ -TV problem . . . . .	137
4.	Numerical examples and results . . . . .	137
5.	Discussion . . . . .	141

5.1.	Additional test cases . . . . .	144
6.	Conclusions . . . . .	147
<b>C. Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso cuasi-Newton secuencial</b>		<b>153</b>
1.	Introducción . . . . .	156
2.	Problema térmico directo . . . . .	157
2.1.	Ecuaciones de gobierno . . . . .	157
2.2.	Formulación de elementos finitos . . . . .	158
3.	Problema térmico inverso de conducción de calor . . . . .	159
4.	Método cuasi-Newton secuencial . . . . .	159
4.1.	Derivación de los problemas de sensibilidad y adjunto . . . . .	159
4.2.	Proceso iterativo . . . . .	161
4.3.	Algoritmo computacional para la implementación secuencial . . . . .	161
5.	Caso de estudio: tratamiento térmico de austemperado . . . . .	163
6.	Resultados y discusión . . . . .	164
7.	Conclusiones . . . . .	165
<b>D. Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime</b>		<b>167</b>
1.	Introduction . . . . .	170
2.	Governing Equations . . . . .	172
2.1.	Transient heat conduction . . . . .	172
2.2.	The transient heat flux manipulation problem . . . . .	174
2.3.	Sensitivity Analysis . . . . .	175
3.	Design of a device for transient heat flux manipulation . . . . .	177
3.1.	Definition of the optimization problem . . . . .	178
4.	Results and discussion . . . . .	179
4.1.	On the importance of designing for transient regime . . . . .	181
5.	Application to multiple tasks . . . . .	183
6.	Conclusions . . . . .	184

# Índice de figuras

2.1.	Configuración del problema PD1 y computo de cantidades adimensionales. . . .	18
2.2.	Representación esquemática del mapeo directo . . . . .	21
2.3.	Discretización del flujo transiente $q(t)$ . Nótese que en cada intervalo de tiempo el valor del flujo adoptado corresponde al valor calculado en el punto medio del intervalo. Por ejemplo, $q_M = \frac{1}{2}(q(\tau_M) + q(\tau_{M-1}))$ . . . . .	29
2.4.	Configuración del problema inverso PI1. . . . .	31
2.5.	Esquema conceptual de la regularización de problemas inversos lineales. . . . .	33
2.6.	Esquema conceptual de la regularización de problemas inversos no lineales. . . .	40
3.1.	Configuración del problema PD2. . . . .	45
3.2.	Forma funcional $q(t) \equiv q_M$ asumida constante en los $r = 5$ pasos definidos delante de $t_{M-1}$ , para determinar la componente del flujo correspondiente al instante $t_M$ (identificada mediante un tramado oblicuo), conociendo las componentes $q_1, q_2, \dots, q_{M-1}$ . . . . .	49
4.1.	Curva de Nukiyama. Se aprecian los diferentes regímenes de ebullición para un amplio rango de valores de $\Delta T$ , siendo $T_w$ la temperatura de la superficie de la pieza a enfriar y $T_f$ la temperatura del medio fluido, y los puntos CHF y LP. . . .	64
4.2.	Geometría del problema bidimensional axisimétrico. . . . .	65
4.3.	Geometría del problema, malla de elementos finitos, e historia de temperaturas $Y(t)$ en el punto $s$ según Vázquez-Gómez et al. (2012). . . . .	66
4.4.	Flujo de calor (en $W/m^2$ ) obtenido con el SQNM en comparación a la referencia. . . . .	68
4.5.	Curvas de temperatura y flujos superficiales medidas en el punto $r = R$ y $z = 0$ . . . . .	69
A.1.	Domain and boundary conditions of the IHCP. . . . .	97
A.2.	Discretization of the transient HTC function. . . . .	98
A.3.	One dimensional discretization and main features of the inverse set up. . . . .	106
A.4.	Reconstruction of HTC achieved with SQNM. . . . .	108

A.5. Reconstruction of HTC for $\omega = 0.05$ , achieved with SQNM and SFSM . . . . .	110
A.6. Reconstruction of HTC when $x_s = L/4$ ( $\omega = 0.05$ ). . . . .	111
A.7. Reconstruction of HTC when $x_s = L/2$ ( $\omega = 0.05$ ). . . . .	112
A.8. Reconstruction of HTC when $x_s = 3L/4$ ( $\omega = 0.05$ ). . . . .	113
A.9. Two-dimensional geometry and FEM mesh, together with the main features of the problem. . . . .	114
A.10. Reconstruction of the three different transient heat transfer coefficient functions $h^1(t)$ , $h^2(t)$ , and $h^3(t)$ acting on the boundary portions $\Gamma_1$ , $\Gamma_2$ , and $\Gamma_3$ , respectively. . . . .	117
B.1. Considered domain and its main features of the inverse heat conduction problem. . . . .	129
B.2. Evolution of the heat flux reconstructions corresponding to different regularization parameters (Test Case A, $\epsilon = 0.01$ ). . . . .	139
B.3. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case A, $\epsilon = 0.01$ ). . . . .	140
B.4. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case A, $\epsilon = 0.05$ ). . . . .	140
B.5. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case B, $\epsilon = 0.01$ ). . . . .	141
B.6. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case B, $\epsilon = 0.05$ ). . . . .	141
B.7. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case C, $\epsilon = 0.01$ ). . . . .	146
B.8. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case C, $\epsilon = 0.05$ ). . . . .	146
B.9. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case D, $\epsilon = 0.01$ ). . . . .	147
B.10. L-curves obtained for the three $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case D, $\epsilon = 0.05$ ). . . . .	147
C.1. Geometría del problema bidimensional axisimétrico. . . . .	158
C.2. Geometría del problema, malla de elementos finitos, e historia de temperaturas $Y(t)$ en el punto $s$ según Vázquez-Gómez et al. (2012). . . . .	163
C.3. Flujo de calor (en $W/m^2$ ) obtenido con el MQNS en comparación a la referencia. . . . .	165
D.1. Thermal problem in a macroscopic domain $\Omega$ where the effective properties depend on a quantitatively characterized microstructure. . . . .	173



D.2. Design of a thermal shield: domain  $\Omega = \Omega_{\text{out}} \cup \Omega_{\text{shield}} \cup \Omega_{\text{dev}}$ , boundary conditions and finite element mesh. On the right, representative volume element at the finite element  $\Omega^{(e)}$  in the device  $\Omega_{\text{dev}}$ . . . . . 177

D.3. Optimal metadvice for shielding in transient regime: relative thickness of copper ( $d$ ) and orientation of the laminates ( $|\theta|$ ). . . . . 179

D.4. Optimal metadvice for shielding in transient regime: effective volumetric heat capacity  $\rho c$  and components  $k_{ij}$  of the thermal conductivity with respect to the  $xy$  frame. . . . . 180

D.5. Optimal metadvice for shielding in transient regime: temperature and heatlines in the whole plate at different time instants. . . . . 180

D.6. Optimal metadvice for shielding in transient regime: Temperature along the  $x$ -axis (symmetry axis) at different instants, comparing with the case of the homogeneous plate (without device). . . . . 181

D.7. Optimal metadvice for shielding in steady state: relative thickness of copper ( $d$ ) and orientation of the laminates ( $|\theta|$ ). . . . . 181

D.8. Evolution of the instantaneous error  $g$  in the accomplishment of the transient shielding task using either the metadvice specifically designed for transient regime or that designed for the steady state, related to the error  $g_0$  for the case of the homogeneous plate. . . . . 182

D.9. Evolution of the temperature at the center of the shielded region from the start of the second heating stage ( $t_1 = 30000$  s). [Figure 9 near here] . . . . . 182

D.10. Optimal metadvice for shielding and cloaking in transient regime: relative thickness of copper ( $d$ ) and orientation of the laminates ( $|\theta|$ ). . . . . 183

D.11. Optimal metadvice for shielding and cloaking in transient regime: temperature and heatlines in the whole plate at different time instants. . . . . 184



# Índice de tablas

A.1. Thermo-physical properties of 1008 steel according to Handbook (2005) . . . . .	105
A.2. Errors obtained with the proposed SQNM together with the values achieved with SFSM. . . . .	107
B.1. Error values according to the RMSE formula for Test Case A and B. . . . .	138
B.2. Error bias and variance components for Test Cases A and B. . . . .	144
B.3. Error values according to the RMSE formula for Test Cases C and D. . . . .	145
B.4. Error bias and variance components for Test Cases C and D. . . . .	145



# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación

#### 1.1.1. Contexto regional y nacional

En los últimos años, el Estado Nacional ha realizado esfuerzos concretos para dar impulso a determinados sectores económicos e industriales de interés estratégico por medio de su vinculación y articulación con sectores dedicados a actividades de Ciencia y Tecnología. Tal es el caso del Plan Nacional de Ciencia, Tecnología e Innovación “Argentina Innovadora 2020” ([Ministerio de Ciencia, Tecnología, e Innovación Productiva \(MinCyT\), 2012](#)). Allí se definen áreas o sectores de la industria y de la actividad productiva que son considerados de interés estratégico para el Estado Nacional debido a su alto impacto económico, tecnológico o social, denominados como núcleos socio-productivos estratégicos (NSPE). Entre los NSPEs en los que se enfoca esta Tesis, destacan el NSPE 1 (Agroindustria) y su sub-núcleo 4 (Maquinaria Agrícola), así como el NSPE 5 (Industria) y sus sub-núcleos 24 (Autopartes) y 28 (Tecnologías para logística y transporte). Además de contribuir al plan “Argentina Innovadora 2020” del MinCyT, esta Tesis también aporta a objetivos complementarios del Estado Nacional como el “Plan Operativo Quinquenal 2016-2020” trazado por el entonces [Ministerio del Interior y Transporte \(2016\)](#) para la renovación y fomento del sistema ferroviario nacional.

Los NSPE y los sub-núcleos mencionados definidos en “Argentina Innovadora 2020” evidencian la intención del Estado Nacional de aunar esfuerzos provenientes del sistema científico-tecnológico argentino con el sector productivo, en pos de utilizar materiales y/o procesos productivos alternativos en componentes mecánicos, estructurales o no, destinados a prestar servicio como componentes de maquinaria agrícola, ferroviaria y de automóviles. La finalidad perseguida se relaciona con diversos factores, entre los que se pueden mencionar la reducción de costos de manufactura, el aprovechamiento de instalaciones y facilidades existentes en pequeñas y media-

nas empresas y la reducción del consumo de energía durante la fabricación. Existen estudios que refuerzan estas necesidades, elaborando proyecciones hacia el año 2025. [Bragachini y Sánchez \(2016\)](#) destacan la necesidad de fabricar máquinas agrícolas más livianas con el fin de evitar agresiones al suelo y de reducir emisiones contaminantes. Para ello, proponen el uso de materiales alternativos más resistentes y más livianos, como también el desarrollo de tecnologías de fabricación más eficientes. Un argumento similar es esgrimido por [Sica et al. \(2012\)](#) para el caso de la industria automotriz, haciendo especial énfasis en la reducción de emisiones contaminantes a través del uso de tecnologías diversas, entre las que se menciona el uso de materiales más livianos y resistentes.

En el contexto anteriormente expuesto, el hierro dúctil austemperado (de ahora en adelante ADI, por sus siglas en inglés) emerge como una alternativa válida en virtud de una serie de ventajas ([Keough et al., 2010](#); [Harding, 1991](#); [Voigt y Loper, 1984](#); [Tanaka y Kage, 1992](#); [Blackmore y Harding, 1984](#)) que incluyen: reducido costo de manufactura comparado con componentes de acero o aluminio colados y/o forjados; flexibilidad en el diseño de componentes debido a que se obtiene por colada de fundición nodular en moldes; elevada relación resistencia-peso en virtud de tener una densidad 10 % inferior a la del acero; resistencia a la abrasión y al desgaste; excelentes propiedades dinámicas como resistencia a la fatiga y al impacto; buena relación resistencia-ductilidad; entre otras. El ADI es un material que se obtiene luego de practicar un tratamiento térmico de austemperado a una pieza de hierro dúctil. En términos metalúrgicos, el hierro dúctil es un tipo de fundición gris en la que el grafito adopta la forma de esferas o nódulos en la matriz metalográfica como consecuencia del empleo de agentes nodularizantes, puntualmente Magnesio o Cerio ([Bramfitt y Benscoter, 2001](#)), en lugar de la forma típica de laminillas que caracteriza la microestructura de la fundición gris. El material resultante es también identificado como fundición “nodular” o de “grafito esferoidal”. La particular forma del grafito en estas aleaciones le confieren al material un nivel de ductilidad superior en comparación con otras fundiciones ([Bramfitt y Benscoter, 2001](#)), lo cual da origen a su denominación.

### **Sectores productivos de agropartes, autopartes y ferropartes**

Hacia el año 2016 en Argentina existían al menos 350 empresas, todas ellas PyMEs, dedicadas a la fundición de componentes metálicos ferrosos y no ferrosos, con una capacidad instalada de aproximadamente 200 mil toneladas anuales ([Fundación de Investigaciones para el desarrollo \(FI-DE\), 2017](#)). Este conglomerado abastece principalmente a los sectores industriales de maquinaria agrícola, automotriz y ferroviario ([Observatorio Permanente del Sector Fundidor, 2019](#); [Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva \(MinCyT\), 2013](#); [Consejo Federal de Inver-](#)

siones (CFI), 2016) a través del suministro de piezas o partes manufacturadas (incluyendo bajo este término a las partes y piezas, sub-conjuntos y conjuntos) que integran equipos o maquinaria más complejos. Según el estudio, en 2016 la producción combinada de fundiciones ferrosas y no ferrosas alcanzó las 97 mil toneladas. Un 62 % (60,4 mil toneladas) de tal volumen correspondió a fundición gris y nodular. El *Observatorio Permanente del Sector Fundidor* (2019) reconoce el carácter estratégico del sector en cuestión para el desarrollo industrial del país, analizando también su realidad dentro del contexto nacional y regional e identificando fortalezas, oportunidades, debilidades y desafíos.

Según *Bragachini y Sánchez* (2016), en Argentina existían al menos 890 PyMEs productoras de maquinarias y agropartes, y 290 de agrocomponentes metalúrgicos y electrónicos, ubicadas principalmente en las provincias de Santa Fe (clúster Centro-Sur de Santa Fe), Córdoba (clúster Sur de Córdoba), Buenos Aires (Distrito de Maquinaria Agrícola del Oeste de la Provincia de Buenos Aires (DIMA)) y en menor medida Entre Ríos (*Gorenstein y Moltoni*, 2011; *Bragachini*, 2003). La fabricación de agropartes de fundición gris y nodular tiene una participación significativa en el sector, lo cual queda de manifiesto en diversos estudios (*Ministerio de Hacienda y Finanzas Públicas - Presidencia de la Nación*, 2016; *Ministerio de Hacienda - Presidencia de la Nación*, 2017; *Ministro de Economía - Secretaría de Planificación y Política Económica*, 2015).

Los estudios llevados a cabo por el *Observatorio Permanente del Sector Fundidor* (2019), *Gorenstein y Moltoni* (2011) y *Unión Industrial Argentina (UIA)* (2008) destacan el elevado grado de articulación existente entre las compañías fabricantes, las instituciones públicas de ciencia y tecnología (a saber: el Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria (INTA), el Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET) y la Dirección de Asistencia Técnica de la Provincia de Santa Fe (DAT)) y los centros tecnológicos privados (DIMA) y público-privados (Fundación CIDETER). El potencial de desarrollo de componentes de hierro fundido se encuentra íntimamente ligado a esta articulación. A modo de ejemplo de dicha articulación se puede citar el Cuaderno Tecnológico N°9 de *Downes y Krahmer* (2014), integrante del proyecto de “Mejoras de las economías regionales y desarrollo local” impulsado por el INTI en colaboración con la Unión Europea. En dicho cuaderno se exponen diversos conocimientos tecnológicos y empíricos en materia de obtención de fundición nodular con el fin de proporcionar herramientas a las compañías fundidoras para obtener un alto rendimiento en la fabricación de sus piezas.

Por su parte, la industria automotriz también cuenta con un enorme potencial para desarrollar la producción de componentes de fundición de hierro (*Consejo Federal de Inversiones (CFI)*, 2016; *Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva (MinCyT)*, 2013; *Centro Interdiscipli-*

nario de Estudios en Ciencia, Tecnología e Innovación (CIECTI), 2017). Un estudio llevado a cabo por la Cámara de Industriales Fundidores de la República Argentina (2011) muestra el contraste de la participación del tonelaje de fundición por vehículo producido en Argentina, Brasil y México. Mientras que en éstos últimos la participación superó el 80 %, en Argentina la participación fue sólo del 21 %, evidenciando una gran incidencia de componentes importados en la fabricación nacional de automóviles. Es aquí donde queda de manifiesto el potencial para impulsar el desarrollo de la industria de la fundición en el sector automotriz, que a su vez cuenta con el apoyo de normativas y leyes de fomento nacionales (Boletín Oficial de la República Argentina, 01/08/2016). Sin embargo, el grado de articulación con sectores de I+D+i es inferior al existente en el caso de la industria de maquinaria agrícola y agropartes (Unión Industrial Argentina (UIA), 2008).

En cuanto al sector productivo de ferropartes, la fundición gris y nodular también cuenta con un elevado potencial de desarrollo no sólo por las posibilidades de uso de esta clase de fundiciones en la producción de partes e insumos para material rodante, sino también por el apoyo concreto brindado por las entidades del sector y del estado nacional para fortalecer dicha cadena de valor. En este sentido, se pueden mencionar diferentes iniciativas y planes de fomento, como el “Programa de proveedores de la industria ferroviaria” (Asociación de Industriales Metalúrgicos de la República Argentina (ADIMRA), 2016), respaldado por el “Programa de Desarrollo de Proveedores (PRODEPRO)” (Boletín Oficial de la República Argentina, 22/07/2016).

## Sumario

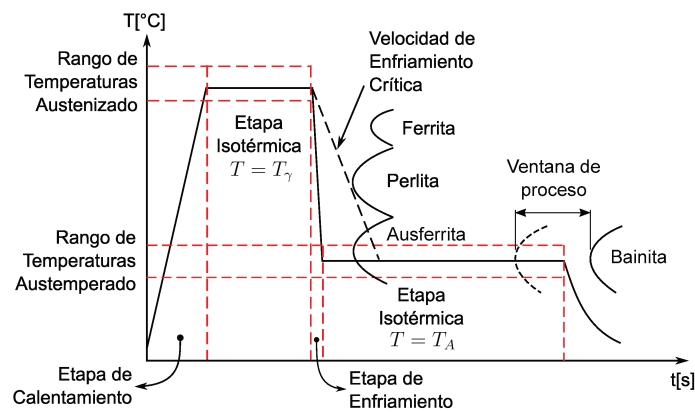
Se observa una fuerte intención por parte de los diferentes actores (Estado Nacional, sector empresarial, instituciones de I+D+i) de lograr la sinergia necesaria para dar impulso y desarrollar la industria de fabricación de componentes fundidos para integrar la cadena de valor del sector productivo metalmeccánico. Esto constituye una oportunidad única para impulsar el diseño de componentes de ADI y su fabricación a escala industrial, con la calidad requerida por los clientes de los diferentes sectores.

### 1.1.2. Proceso de obtención de ADI y características principales del material

Típicamente, el proceso de obtención de componentes de ADI incluye los siguientes pasos: a) colada de la fundición nodular en estado líquido dentro de un molde, y enfriamiento hasta la temperatura ambiente; b) mecanizado del componente, para obtener la forma deseada; c) tratamiento térmico de austemperado; y d) operaciones de acabado final. El tratamiento de austemperado consiste en un calentamiento del componente desde la temperatura ambiente hasta la temperatura de austenización  $T_\gamma$  comprendida en un rango de entre 850 y 950°C, la que se mantiene por un



período de entre 20 minutos y dos horas. La práctica habitual consiste en realizar este calentamiento mediante el uso de hornos industriales en los que la atmósfera se mantiene bajo estricto control. La siguiente etapa consiste en enfriar la pieza lo más rápido posible hasta la temperatura de austemperado  $T_A$  comprendida entre los 250 y 400°C, y mantenerla por un período de entre 30 minutos y dos horas. Para llevar a cabo esta etapa se recurre habitualmente al enfriamiento por inmersión en baños de sales. Por último, la pieza es enfriada al aire hasta alcanzar la temperatura ambiente. La figura 1.1 muestra de manera esquemática la curva teórica del tratamiento térmico de austemperado.



**Figura 1.1:** Curva teórica de la historia de temperaturas correspondiente a un tratamiento térmico de austemperado.

Las propiedades mecánicas del ADI son consecuencia directa de la microestructura alcanzada al final del tratamiento térmico (Voigt y Loper, 1984; Tanaka y Kage, 1992; Yescas et al., 2001; Boccardo, 2017; Blackmore y Harding, 1984), la cual consiste en nódulos de grafito embebidos en una matriz metálica compuesta por ferrita acicular y austenita enriquecida en carbono, llamada ausferrita. A su vez, es posible identificar diferentes calidades de ADI en función del tipo de matriz ausferrítica obtenida (Blackmore y Harding, 1984), la cual puede caracterizarse por el porcentaje de austenita retenida. En este sentido, las denominaciones “ausferrita inferior” y “ausferrita superior” refieren a una cantidad baja en el primer caso y elevada en el segundo. Una matriz ausferrítica inferior, alcanzable mediante una temperatura de austemperado  $T_A$  baja, proporciona elevada dureza y resistencia al desgaste. Por otra parte, una matriz ausferrítica superior, la cual se logra empleando temperaturas de austemperado  $T_A$  más elevadas, es la responsable de proporcionar elevada resistencia mecánica a la fatiga. La norma americana ASTM A897 / A897M-16 (2016) define cinco grados de ADI en función de las propiedades mecánicas de la pieza final.

Las etapas de mayor criticidad en la obtención de ADI son la etapa de enfriamiento entre las temperatura de austenización y de austemperado, y la etapa isotérmica donde  $T = T_A$ . En la primera, la tasa de remoción de calor durante la etapa de enfriamiento desde  $T_\gamma$  hacia  $T_A$  debe ser lo suficientemente intensa para evitar la formación de fases metalográficas indeseables como perlita

o ferrita eutectoides. Las propiedades particulares de los baños de sales, tales como su bajo punto de fusión, estabilidad a elevada temperatura y elevada capacidad calorífica específica, así como su rango de operación típico entre 150 y 600°C (dependiendo de la composición química), permiten asegurar dichas tasas de enfriamiento (Pereira et al., 2020; Liščić et al., 2013). El concepto de “velocidad de enfriamiento crítica” (ver figura 1.1) indica la menor velocidad de enfriamiento posible previo a la aparición de tales fases. El agregado de elementos aleantes como Cu, Ni, Mn y Mo en el hierro dúctil genera un movimiento hacia la derecha la “nariz” de la transformación perlítica, lo cual permite la obtención de una matriz metalográfica ausferrítica libre de perlita aún en condiciones de enfriamiento menos intensas. La “austemperabilidad” (Dorazil et al., 1982; Voigt y Loper, 1984) de una pieza, definida como su capacidad para formar una matriz completamente ausferrítica luego del proceso de austemperado, depende entonces de los parámetros antes mencionados.

Por otra parte, la criticidad de la etapa isotérmica donde  $T = T_A$  está relacionada a la transformación metalográfica que tiene lugar allí, la cual se define habitualmente como una reacción de dos etapas (Moore et al., 1986): la etapa I, que consiste en la descomposición de la austenita en ferrita y en austenita enriquecida en carbono; y la etapa II, donde la austenita enriquecida se descompone en ferrita y carburos (Achary y Venugopalan, 2000; Janowak y Gundlach, 1983). Estas etapas ocurren una a continuación de la otra. Sin embargo, existe un período de tiempo entre el final de la etapa I y el comienzo de la etapa II donde prácticamente no ocurren cambios ni en la morfología ni en la composición de la austenita estabilizada (Tanaka y Kage, 1992; Voigt y Loper, 1984), denominado “ventana de proceso” o “período ventana” (ver figura 1.1) (Janowak y Gundlach, 1983). Durante este período de tiempo, las propiedades mecánicas del componente alcanzan su valor óptimo (Tanaka y Kage, 1992). A su vez, la ocurrencia de la etapa II de la reacción es altamente indeseable (Janowak y Gundlach, 1983; Tanaka y Kage, 1992; Voigt y Loper, 1984), debido a que la formación de carburos ocasiona un fuerte detrimento en las propiedades mecánicas del componente. En conclusión, el tiempo de austemperado debe quedar comprendido dentro de la mencionada ventana, cuya extensión depende principalmente del contenido de carbono en la austenita durante la transformación y del contenido de aleantes (Rundman et al., 1988). En general, se busca que la extensión de dicha ventana sea lo mayor posible.

Los parámetros que controlan las propiedades del material resultante, en particular las condiciones de solidificación, la composición química y microestructural de la fundición nodular resultante, la temperatura y el tiempo de austenizado, la velocidad de enfriamiento, la temperatura y el tiempo de austemperado (Tanaka y Kage, 1992; Voigt y Loper, 1984), pueden variar en un rango relativamente amplio para obtener una diversidad muy grande de propiedades mecánicas y

funcionalidades del ADI final. Sin embargo, es la correcta selección de los parámetros de proceso del tratamiento térmico la que permite establecer las condiciones necesarias para fabricar componentes que garantizan mínimamente el cumplimiento de propiedades mecánicas preestablecidas, correspondientes a un grado específico (Voigt y Loper, 1984).

Algunos de los trabajos pioneros más significativos donde se evidencia la inter-dependencia de los diversos factores tecnológicos en el proceso de obtención de ADI son los trabajos de Voigt y Loper (1984), Tanaka y Kage (1992), Rundman et al. (1988), Blackmore y Harding (1984), entre otros, donde los autores identificaron las variables de proceso de mayor influencia y su interacción, en relación a propiedades de interés de la pieza final. Más recientemente, Yescas et al. (2001) y Yescas (2003) elaboraron bases de datos a partir de la información disponible en la bibliografía experimental publicada hasta el año 2001 y 2003 respectivamente, para construir modelos predictivos basados en redes neuronales artificiales capaces de predecir propiedades mecánicas o microestructurales, partiendo del conocimiento de las variables de proceso (como las temperaturas y tiempos de austenizado y austemperado) y de la composición química del hierro dúctil (puntualmente, la presencia de aleantes como Si, Cu, Ni, Mo, Mg, entre otros). Posteriormente, una gran cantidad de trabajos ha sido propuesta en los que se buscó asociar a través de diferentes técnicas las propiedades mecánicas de interés y las variables de proceso (Perzyk et al., 2014; PourAsiabi et al., 2012; Yang et al., 2013; Wilk-Kolodziejczyk et al., 2016; Biernacki et al., 2006; Guo, 2014; Savangouder et al., 2019; Hammood y Lieth, 2013).

En Argentina, el trabajo llevado a cabo por diversos investigadores y grupos especializados ha permitido expandir la frontera del conocimiento respecto al ADI a través de variados aportes significativos. Echeverría et al. (2000) estudiaron los efectos de la microestructura y de parámetros geométricos sobre la variación dimensional producto del tratamiento térmico y de las modificaciones microestructurales; Martínez et al. (2002) evaluaron el desempeño en servicio de autopartes de ADI de pared delgada de alta resistencia mecánica; Sosa et al. (2016) estudiaron mecanismos de corrosión en piezas de ADI; Fernandino et al. (2020b,a) evaluaron el mecanismo de daño en probetas de ADI parcialmente austenizadas sometidas a ensayos de tracción; entre otras contribuciones. En el ámbito del modelado computacional, Boccardo (2017) realizó contribuciones significativas a través de la proposición de modelos termo-mecánico-metalúrgicos para predecir la evolución microestructural durante el tratamiento térmico de austemperado de fundiciones nodulares, las cuales quedaron plasmadas en sendas publicaciones científicas (Boccardo et al., 2014, 2017b,a, 2018c,b,a).

### 1.1.3. Desafíos en la obtención de ADI

Uno de los factores principales que limita el uso extendido del ADI en la práctica es la dificultad en predecir sus propiedades mecánicas en relación a la microestructura alcanzada al final del tratamiento térmico. Como se mencionó en la sección previa, dicha dificultad es consecuencia de la complejidad de los fenómenos físicos, y su interdependencia, que tienen lugar durante el proceso industrial, y los efectos que generan sobre las propiedades mecánicas del componente final. A esto se suma la dificultad de obtener en la práctica una microestructura homogénea en todo el volumen de la pieza debido a la geometría y tamaño de una pieza en particular. En general, se busca que la velocidad de enfriamiento sea lo suficientemente rápida y uniforme en toda la pieza para evitar no sólo una distribución inhomogénea de las diversas fases metalográficas, sino también la presencia de gradientes térmicos disímiles que favorezcan la aparición de tensiones residuales. En este contexto, la presencia de diferentes espesores y tamaños de sección transversal va en detrimento de la condición de homogeneidad de las velocidades de enfriamiento. A su vez, los tiempos de austenizado y austemperado no siempre pueden ser seleccionados en base a los tamaños de sección mayores con el fin de homogeneizar la temperatura en todo el volumen de la pieza, dado que a medida que dichos tiempos se prolongan tienen lugar efectos adversos como el agrandamiento del tamaño de grano durante el austenizado (Batra et al., 2005) o la aparición de carburos en la microestructura durante el austemperado (Tanaka y Kage, 1992; Voigt y Loper, 1984) luego de superarse el tiempo máximo dado por el período ventana (Janowak y Gundlach, 1983).

En general, no sólo se evita el uso de piezas de gran sección transversal debido a la reducción significativa de su austemperabilidad en regiones más alejadas de sus fronteras externas (Sohi et al., 2010), sino que también se tiende al desarrollo de piezas cada vez más delgadas. De hecho, el tratamiento de austemperado ha sido practicado sobre piezas de hierro dúctil de pared delgada (Stefanescu et al., 2002), dando lugar a lo que se conoce como “hierro dúctil austemperado de pared delgada” (Nofal y Jekova, 2009), o TWADI por sus siglas en inglés, el cual presenta propiedades aún superiores al ADI convencional. El hecho de mantener espesores delgados implica una serie de ventajas (Nofal y Jekova, 2009; Fraš y Górný, 2009; Vidyarthi y Singh, 2014) como que el agregado de aleantes se mantenga restringido a valores mínimos, que el conteo nodular aumente, que el tamaño de los nódulos de grafito disminuya, que la formación de carburos se suprima, entre otros.

Por su parte, el método habitual de enfriamiento de la pieza por inmersión en baño de sales es un proceso cuya variabilidad es muy amplia debido a la complejidad del fenómeno de transferencia térmica que tiene lugar a través de la superficie externa de la pieza (Liščić et al., 2013),

especialmente en piezas de geometría compleja. La composición de las sales, su concentración y su deterioro a medida que se emplea sucesivamente (lo cual reduce su capacidad de remover la energía térmica de la pieza) es también un agravante al momento de llevar a cabo un control estrecho de los parámetros de proceso. A su vez, el impacto ambiental generado por la disposición final de dichas sales y por la liberación de gases NOx en operación (Pereira et al., 2020; Liščić et al., 2013) son factores limitantes para su uso a gran escala.

La normativa ASTM A897 / A897M-16 (2016) y la práctica estándar establecen que las condiciones de proceso deben ser determinadas de manera conjunta entre el cliente y el especialista en el proceso del tratamiento térmico. De esta condición se desprende que existe un conjunto de parámetros óptimos para cada pieza particular, y que su determinación en la actualidad depende más de conocimientos empíricos, tanto del cliente como del especialista, que de motivos científicamente fundamentados. Por último, el control estrecho, a nivel industrial, de una cantidad tan elevada de variables de proceso y tecnológicas a lo largo de todo el proceso industrial representa un desafío tecnológico mayúsculo. Todas estas dificultades tecnológicas han limitado el uso extendido del ADI como alternativa a los materiales que intenta reemplazar.

## **1.2. Herramientas computacionales orientadas al control de procesos en la obtención de ADI**

El conocimiento empírico generado durante muchos años en un determinado proceso industrial resulta esencial para garantizar su repetitividad y predictibilidad con el fin de asegurar la calidad del producto final. Sin embargo, la creciente competitividad de las compañías, dada por su capacidad de proveer a los clientes productos que cumplan con sus requerimientos técnicos cada vez más exigentes en términos de calidad y costos, ha impulsado el desarrollo de los procesos productivos hacia niveles más especializados (Rogalewicz y Sika, 2016). Es así que los especialistas a cargo de dichos procesos han incorporado nuevas herramientas científicas y tecnológicas complementarias a los conocimientos empíricos existentes, capaces de generar las condiciones para lograr dichos estándares de calidad. En este contexto, las herramientas computacionales han demostrado ser altamente disruptivas en tareas como la optimización y control de procesos industriales de obtención de ADI. Los principales ejemplos son:

- Modelos basados en datos y en aprendizaje de máquina. Son aquellos que permiten caracterizar comportamientos observados y/o realizar predicciones de un determinado proceso solamente en base a información histórica del mismo contenida en bases de datos a través de técnicas como regresión, clasificación, agrupamiento o *clusterización*, reducción de dimen-

siones, entre otras (Shahbaz et al., 2010; Rogalewicz y Sika, 2016). En este sentido, resulta posible adquirir niveles elevados de complejidad del sistema a modelar a partir de un conocimiento reducido de la física subyacente (Perzyk et al., 2014). Existen varios ejemplos de uso de las técnicas mencionadas en relación a la caracterización y control del proceso de obtención de ADI (Perzyk et al., 2014; Yescas et al., 2001; Yescas, 2003; Wilk-Kolodziejczyk et al., 2016, 2018), entre otros.

- Modelos matemáticos térmicos, mecánicos, metalúrgicos y combinaciones de ellos. Son aquellos en los que se investigan las leyes que gobiernan un determinado fenómeno físico, las cuales son modeladas mediante ecuaciones diferenciales. En la práctica, la resolución de esta clase de modelos se alcanza mediante aproximaciones numéricas que convierten las ecuaciones en derivadas parciales en sistemas de ecuaciones algebraicas. Si bien el conocimiento que se adquiere de la física del problema a analizar es muy preciso, el nivel de complejidad no ha de ser muy elevado para evitar incrementar en demasía el costo computacional. Una de las principales contribuciones en esta categoría en relación a ADI fue la de Boccardo (2017), quien propuso un modelo acoplado termo-mecánico-metalúrgico capaz de predecir los diferentes fenómenos físicos y su interacción durante un tratamiento térmico de austemperado de una pieza de hierro dúctil.
- Modelos térmicos inversos. Esta categoría incluye el uso de técnicas numéricas como las mencionadas en el ítem anterior, pero el objetivo no es el modelado de las ecuaciones de gobierno del problema, sino la estimación indirecta de ciertas características o parámetros (desconocidos) del proceso a caracterizar, partiendo de datos medidos (o simulados) de dicho proceso, típicamente la temperatura en algún punto de interés de un cuerpo. Existen pocos ejemplos del uso de estas técnicas en el proceso de obtención de ADI. El trabajo de Vázquez-Gómez et al. (2012) constituye un ejemplo de aplicación de estas técnicas.

En el ámbito de los fenómenos de transferencia de calor, los modelos inversos han sido ampliamente utilizados con diversos fines (Ozisik, 2000). Entre los ejemplos más destacados se encuentran la estimación de parámetros termo-físicos como la conductividad térmica o la capacidad calorífica (Huntul y Lesnic, 2017; Farahani y Kisomi, 2020; Kim et al., 2003a; Liu, 2011); la caracterización de fenómenos de transferencia de calor superficial (Mohebbi et al., 2019; Abdelhamid et al., 2018; Samadi et al., 2012; Joachimiak et al., 2019; Skubisz y Adrian, 2018; Su y Hewitt, 2004), incluyendo condiciones de flujo de calor, coeficientes de convección y parámetros de radiación; la estimación de la evolución de las fronteras de cambio de fase en procesos de solidificación (Nejad et al., 2010b,a); entre otros.

Puntualmente, la caracterización de los fenómenos de transferencia de calor superficial a través

de métodos inversos que tienen lugar durante un proceso industrial de tratamiento térmico permite:

- Conocer los fenómenos locales y transitorios del intercambio térmico a través de la frontera externa de un cuerpo (Ramesh y Prabhu, 2014; Beck et al., 2013; Nallathambi y Specht, 2009; Osman y Beck, 1990; Babu y Kumar, 2010; Rao y Prabhu, 2020), por medio de la identificación de las diferentes etapas de la curva de ebullición del fluido que produce el enfriamiento superficial.
- Caracterizar la efectividad de un determinado medio para remover el calor de un componente, lo cual permite el estudio de factibilidad del uso de medios alternativos de enfriamiento (Beck et al., 2013; Nallathambi y Specht, 2009; Liščić y Filetin, 2012).
- Modelar adecuadamente las condiciones de contorno para luego ser introducidas en una simulación numérica del fenómeno termo-mecánico en cuestión (Beck et al., 1985; Ling et al., 2003; Babu y Kumar, 2010; Osman y Beck, 1990; Ramesh y Prabhu, 2014).
- Diseñar instalaciones y procesos de enfriamiento óptimos para una pieza en particular, reemplazando a su vez técnicas tradicionales (Deiters y Mudawar, 1989; Hall y Mudawar, 1995);

### 1.3. Hipótesis planteada

Del análisis de la bibliografía expuesto previamente, se desprende que la mayoría de los estudios llevados a cabo en relación a ADI buscan establecer relaciones de inter-dependencia entre los diversos parámetros de proceso, la composición química del hierro dúctil del que proviene y las propiedades en servicio de la pieza final, mediante la proposición de diversos modelos ya sean “duros” como en el caso de los modelos numéricos o “blandos” como los originados según técnicas basadas en datos y aprendizaje automático (Rogalewicz y Sika, 2016). Sin embargo, son las variables del proceso industrial propiamente dicho las que permiten proveer las condiciones necesarias para disparar los diferentes mecanismos termo-mecánico-metalúrgicos que tienen lugar en el seno de una pieza de hierro dúctil sometida al tratamiento térmico de austemperado.

En esta Tesis se plantea un enfoque alternativo, poniendo especial énfasis en la necesidad de mejorar la capacidad de modelado y simulación de las condiciones de proceso imperantes durante el tratamiento térmico, puntualmente en la etapa de enfriamiento desde la temperatura de austenización hasta la temperatura de austemperado, la cual resulta crítica para el éxito del tratamiento térmico. El fin último de esta hipótesis es no sólo disponer de estrategias necesarias para permitir el control y monitoreo de los procesos de enfriamiento superficial para asegurar la precisión y repetitividad del mismo, sino también permitir la caracterización de los fluidos de enfriamiento empleados por medio de la identificación de las características principales de las

curvas de ebullición respectivas. No se han encontrado prácticamente estudios detallados de dicho mecanismo en la bibliografía revisada, excepto el trabajo de [Vázquez-Gómez et al. \(2012\)](#).

Como es sabido, el mecanismo de remoción de calor superficial de una pieza a elevada temperatura depende de las temperaturas inicial y final del proceso, de la superficie de intercambio térmico y de las condiciones del medio circundante ([Lienhard, 2011](#)). Sin embargo, en el seno de la pieza, los efectos superficiales se encuentran amortiguados y retrasados ([Beck et al., 1985](#)) debido al mecanismo de difusión que gobierna la transferencia de calor dentro de la pieza. Por estas razones, el planteo realizado habilita el abordaje del problema desde un punto de vista estrictamente térmico. Particularmente, los métodos inversos constituyen una herramienta adecuada para estudiar dicho mecanismo de remoción de calor superficial en base a mediciones de temperatura obtenidas en el seno de la pieza a tratar.

Una derivación posible de la hipótesis planteada al inicio de esta sección podría incluir, por un lado, el estudio de métodos de enfriamiento alternativo como el austemperado por aire caliente ([Pereira et al., 2020](#)) o el uso de baños de metales fundidos ([de Souza et al., 2018](#)); y por otro lado, el diseño de facilidades especialmente concebidas para alcanzar condiciones de enfriamiento óptimas. Todo ello haría factible el reemplazo de los medios de enfriamiento habitualmente empleados para el tratamiento térmico de austemperado por otros cuyas características sean más favorables en relación a su repetitividad, sustentabilidad y economía.

## **1.4. Objetivos**

### **1.4.1. Objetivo general**

Desarrollar, adaptar y aplicar herramientas computacionales para asistir al proceso industrial de obtención de ADI mediante el monitoreo y control de las condiciones de transferencia térmica superficial que tienen lugar durante la etapa de enfriamiento del tratamiento térmico de austemperado. En este sentido, se busca caracterizar los fenómenos de transferencia de calor superficial que tienen lugar durante dicha etapa del proceso mediante la identificación de fenómenos transitorios que permita modelar adecuadamente el intercambio térmico entre un componente dado y el medio que produce el enfriamiento.

### **1.4.2. Objetivos particulares**

Como objetivos particulares dentro del alcance de esta Tesis se propone:

- Revisión, actualización y extensión de modelos térmicos y su implementación numérica en geometrías uni- y bi-dimensionales, con la posibilidad de incorporar condiciones geométri-



cas de axisimetría.

- Estudio de los problemas inversos dentro del contexto de procesos industriales de transferencia de calor.
- Elaboración de modelos de cálculo para problemas térmicos inversos.
- Aplicación de los modelos desarrollados a casos prácticos.

## 1.5. Estructura de la Tesis

El contenido de la presente Tesis se organiza en seis capítulos más un anexo. Este último se encuentra integrado por las transcripciones en su idioma original de las diferentes publicaciones derivadas del trabajo de esta Tesis. Tres de ellas corresponden a publicaciones en revistas internacionales con referato, mientras que la restante es un trabajo presentado en un congreso argentino.

El capítulo 2 contiene definiciones básicas de los problemas inversos, las cuales son particularizadas para el caso de problemas térmicos inversos de conducción de calor. En él se hace referencia a uno de los aportes científicos realizados en esta Tesis respecto al empleo de técnicas de regularización de variación total en problemas térmicos inversos (Tourn et al., 2021b). El trabajo completo ha sido publicado en la revista *International Communications in Heat and Mass Transfer*, y es reproducido en el anexo B. En el capítulo 3 se ofrece una reseña de los principales métodos de resolución numérica de los problemas térmicos inversos. Se introduce el método de estimación secuencial cuasi-Newton (Tourn et al., 2021c), el cual constituye otro de los aportes científicos originados en esta Tesis, y que se transcribe por completo en el anexo A. Dicho trabajo ha sido publicado también en la revista *International Communications in Heat and Mass Transfer*. Como antecedente para el desarrollo de los métodos a los que se hace referencia tanto en el capítulo 2 como en el 3 se menciona la publicación científica de Álvarez Hostos et al. (2019) transcrita en el anexo D, la cual ha sido publicada en la revista *Numerical Heat Transfer, Part A*. El capítulo 4 describe un ejemplo de aplicación de la técnica expuesta en el capítulo 3 a un caso de tratamiento térmico de austemperado de una probeta de hierro dúctil para la obtención de ADI, donde no sólo se caracteriza el fenómeno de transferencia de calor superficial durante el proceso industrial, sino que también se evidencian detalles de las etapas de ebullición experimentadas por el medio enfriante durante el proceso. El contenido de este capítulo se basa en un trabajo de investigación de Tourn et al. (2021a) presentado en el XXXVIII Congreso argentino de mecánica computacional (MECOM 2021)(Resistencia, Chaco, 1 al 5 de noviembre 2021), cuya transcripción se halla en el anexo C. Las conclusiones de esta Tesis, junto al listado de publicaciones científicas derivadas de

los trabajos aquí abordados, pueden hallarse en el capítulo 5. Por último, los trabajos futuros se describen y presentan en el capítulo 6.

## Capítulo 2

# Problema térmico inverso de conducción de calor

### 2.1. Introducción

Habitualmente, los *problemas inversos* se definen en contraposición a los denominados *problemas directos*. En general, un problema directo busca predecir un comportamiento futuro de un sistema físico partiendo del conocimiento de su estado presente y de las leyes y parámetros físicos; en cambio, los problemas inversos están relacionados a la determinación del estado presente de un sistema partiendo de observaciones futuras (Engl et al., 1996). En el contexto del estudio de los fenómenos de transferencia de calor en un determinado cuerpo, un problema directo típico consiste en la determinación del campo de temperaturas en el cuerpo conociendo las propiedades termo-físicas del material que lo compone y las condiciones del medio circundante. La metodología de resolución empleada puede utilizarse para calcular la temperatura en determinado/s punto/s de interés, en una región o en todo el dominio de análisis, en un instante de tiempo en particular o en todo un rango temporal. Se trata, entonces, de un *problema directo de conducción de calor*, o DHCP por sus siglas en inglés (Ozisik, 2000). En esta clase de situaciones, existe una relación causa-efecto intuitivamente definida por la experiencia práctica cotidiana. Por ejemplo, el incremento de la carga térmica (causa) sobre un determinado cuerpo, en general traerá aparejado un incremento en su temperatura (efecto).

En cambio, dicha relación causal no resulta *a priori* evidente en los problemas inversos. De hecho, la formulación de esta segunda clase de problemas intenta realizar una *estimación* de las causas (desconocidas) que dan origen a un efecto deseado u observado. En el contexto planteado, un típico *problema inverso de conducción de calor*, o IHCP por sus siglas en inglés, consistiría en la estimación de los flujos de calor superficial incidentes sobre un cuerpo que son responsables de

producir una cierta distribución de temperaturas conocida en determinado/s punto/s interiores del cuerpo en cuestión (Ozisik, 2000).

En la práctica, la imposibilidad de realizar mediciones directas de temperaturas o flujos de calor sobre la frontera de un cuerpo (por ejemplo, debido a las condiciones superficiales extremadamente agresivas a las que puede estar sometido el mismo en un determinado proceso industrial), impone la necesidad de hallar estrategias técnicamente viables. La medición de la temperatura en puntos suficientemente alejados de dicha frontera donde las condiciones sean más propicias para la instalación de instrumentos de medición adecuados, es una alternativa factible. Los registros capturados en dichas ubicaciones son introducidos en un modelo térmico inverso para estimar las condiciones superficiales desconocidas.

Matemáticamente, los DHCP son problemas *bien colocados*. La noción de problema bien colocado fue propuesta por Hadamard (1902), e implica que las siguientes tres condiciones sean satisfechas simultáneamente:

- **Existencia.** Debe haber al menos una solución.
- **Unicidad.** Debe haber a lo sumo una solución.
- **Estabilidad.** La solución debe depender continuamente de los datos de entrada.

Algunos problemas inversos, particularmente los IHCP, son problemas *mal colocados*. Su característica principal es que una o más de una de las condiciones de Hadamard (1902) no son cumplidas, particularmente la tercera, lo cual conlleva grandes desafíos a la hora de hallar una solución. La estabilidad se ve dramáticamente comprometida por la presencia de errores de medición en los datos de entrada del modelo, generando serias dificultades numéricas (Engl et al., 1996; Beck et al., 1985; Ozisik, 2000). En la presentación dada al principio de esta sección, el uso de la palabra *estimación* en la definición de los problemas inversos, no fue casual. Dados los errores inherentemente presentes en las mediciones experimentales de la temperatura, y conociendo la extrema sensibilidad del modelo inverso a dichos errores, la solución puede, a lo sumo, ser estimada (Ozisik, 2000). En general, se asume el cumplimiento de las dos condiciones restantes (Ozisik, 2000) excepto que se demuestre lo contrario.

Para poder hallar una solución al problema inverso se debe recurrir a formulaciones robustas especialmente diseñadas para tratar problemas donde las mediciones incluyan ruido, sin que éste se propague hacia la respuesta. Su finalidad es estabilizar la solución que ha sido corrompida por los datos de entrada afectados por ruido. La técnica se conoce como *regularización* (Engl et al., 1996; Beck et al., 1985; Ozisik, 2000; Vogel, 2002). Existen diversos métodos y justificaciones teóricas que serán desarrollados más adelante. En particular, se hará hincapié en la técnica de regularización por variación total propuesta originalmente por Rudin et al. (1992) para el tratamiento

de problemas de reconstrucción de imágenes. Uno de los aportes de esta Tesis es la aplicación de la técnica de regularización por variación total para la resolución de problemas térmicos inversos (Tourn et al., 2021b). La transcripción completa de dicha publicación puede hallarse en el anexo B.

## 2.2. Estudio de las dificultades en la resolución del IHCP

Consideremos el problema estándar de conducción de calor unidimensional transiente planteado en una placa infinitamente larga de espesor  $L$ , cuya configuración se muestra en la figura 2.1a. La distribución de temperatura en la placa es inicialmente  $T_0$ . En el extremo  $x = 0$  actúa un flujo de calor  $q_c$  para  $t > 0$ , mientras que la frontera opuesta  $x = L$  se encuentra aislada. Las propiedades termo-físicas del material que compone la placa, el calor específico volumétrico  $\rho c$  y la conductividad  $\kappa$ , son conocidas. De ahora en adelante, nos referiremos a este como “problema PD1”, donde la letra “D” indica que se trata de un problema directo y el indicador numérico “1” corresponde al primer tipo de problema que será considerado en esta Tesis. La formulación matemática está dada por el *problema de valores iniciales y de borde* (PVIB) compuesto por la ecuación de conducción de calor unidimensional en régimen transitorio (2.1a) sujeta a las condiciones de borde (2.1b) y (2.1c) y a la condición inicial (2.1d):

$$\rho c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right), \quad 0 < x < L, \quad 0 < t \leq t_f, \quad (2.1a)$$

$$\kappa \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = q_c, \quad x = 0, \quad 0 < t \leq t_f, \quad (2.1b)$$

$$\frac{\partial T(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, \quad 0 < t \leq t_f, \quad (2.1c)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad t = 0, \quad 0 < x < L. \quad (2.1d)$$

donde  $t_f$  representa la duración total del análisis transiente. El problema directo consiste en la determinación del campo de temperaturas  $T(x, t)$  en la región interior del sólido como una función de la posición  $x$  y el tiempo  $t$ . En particular, pondremos especial atención al punto interior  $s$  ubicado en la posición  $x_s$  que denominaremos *sensor*. Esta denominación es común en la literatura de problemas térmicos inversos, ya que es el punto interior del cuerpo donde la temperatura es registrada o medida para ser utilizada en un problema inverso.

La dificultad para hallar una solución al problema térmico inverso está relacionada a las siguientes dos causas (Beck et al., 1985; Alifanov, 1994): el fenómeno de *amortiguamiento* y *retraso*, y la extrema sensibilidad del problema con respecto a los errores en las mediciones.

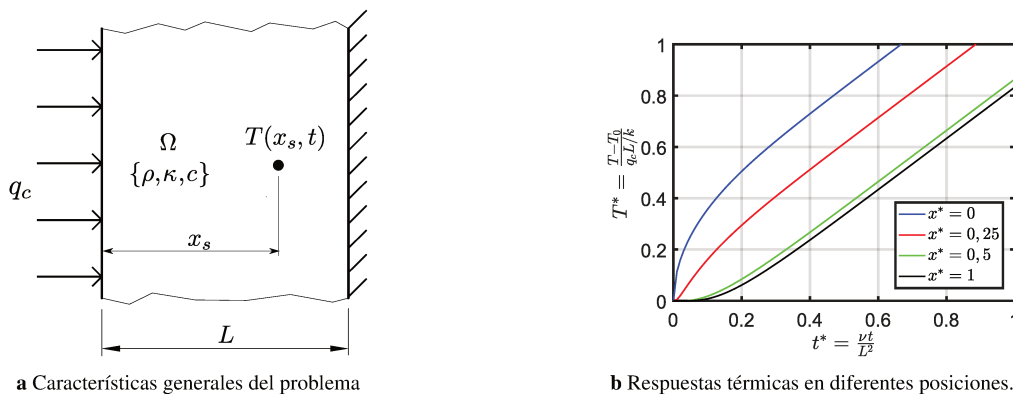


Figura 2.1: Configuración del problema PD1 y computo de cantidades adimensionales.

### 2.2.1. Amortiguamiento y retraso

La solución exacta (Beck et al., 1985) al problema PD1 está dada por la expresión

$$T^*(x^*, t^*) = t^* + \frac{1}{3} - x^* + \frac{1}{2}(x^*)^2 - \frac{2}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} e^{-n^2 \pi^2 t^*} \cos(n\pi x^*), \quad (2.2)$$

donde  $T^*$ ,  $x^*$  y  $t^*$  son magnitudes adimensionales definidas como

$$T^* \equiv \frac{T - T_0}{q_c L / \kappa}, \quad t^* \equiv \frac{\nu t}{L^2} = Fo, \quad x^* \equiv \frac{x}{L},$$

siendo  $\nu = \kappa / (\rho c)$  la difusividad térmica del material que compone la placa y  $Fo$  el número de Fourier que, como se aprecia, coincide con el tiempo adimensional  $t^*$ .

La figura 2.1b muestra las distribuciones transientes de temperatura para los puntos  $x^* = 0$  (coincidente con la superficie donde actúa  $q_c$ ),  $x^* = 0,25$ ,  $x^* = 0,5$ , y  $x^* = 1$  (coincidente con la superficie aislada). Se aprecia que a  $t^* = 0,05$ , la respuesta para  $x^* = 1$  es prácticamente nula, mientras que en  $x^* = 0$  ya ha crecido notablemente. Para  $t^* > 0,5$  se podría considerar que las respuestas se encuentran completamente desarrolladas, adoptando variaciones lineales con respecto al tiempo. El ratio  $T^*(0, t^*) / T^*(1, t^*)$  adopta una proporción de aproximadamente 1000 para  $t^* = 0,05$ , mientras que para  $t^* \gg 1$  dicho ratio se aproxima a la unidad (Beck et al., 1985).

Como se puede apreciar en el análisis precedente, la respuesta transiente de temperatura de un punto interior de la placa es muy diferente a la respuesta de un punto ubicado sobre la superficie. Las temperaturas internas se encuentran disminuidas o amortiguadas en comparación a las temperaturas superficiales. A su vez, se aprecia una demora o retraso en las mismas. Se dice entonces (Beck et al., 1985; Alifanov, 1994) que las respuestas térmicas se encuentran *amortiguadas* y *retrasadas*, lo cual es una consecuencia de la naturaleza difusiva del problema.

### 2.2.2. Inestabilidad frente a errores en las mediciones

En este apartado utilizaremos la solución obtenida por Burggraf (1964) para la temperatura y el flujo de calor superficial en términos de series infinitas de todos los ordenes de derivación de la temperatura  $T(x_s, t) \equiv Y(t)$  y el flujo de calor  $q_s(t)$  en la posición del sensor  $s$ , para geometrías planas, cilíndricas y esféricas. Para el caso de una placa plana de espesor  $L$  como la del problema PD1, la temperatura se expresa como

$$T(x, t) = Y(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)!} \frac{(x_s - x)^{2n}}{\nu^n} \frac{d^n Y}{dt^n} + \dots \\ \dots + \frac{x_s - x}{\kappa} \left[ q_s(t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n+1)!} \frac{(x_s - x)^{2n}}{\nu^n} \frac{d^n q_s}{dt^n} \right], \quad (2.3)$$

mientras que el flujo de calor en  $x = 0$  es

$$q(t) = q_s + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_s^{2n-1}}{(2n-1)!} \frac{1}{\nu^n} \frac{d^n Y}{dt^n} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x_s^{2n}}{(2n)!} \frac{d^n q_s}{dt^n}. \quad (2.4)$$

Consideremos que el sensor se encuentra ubicado en la superficie aislada de la placa, es decir  $x_s = L$ . Dado que allí  $q_s = 0$ , las ecuaciones (2.3) y (2.4) se reducen a

$$T(L, t) = Y(t), \\ q(t) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L^{2n-1}}{(2n-1)!} \frac{1}{\nu^n} \frac{d^n Y(t)}{dt^n}.$$

Para el análisis de estabilidad definiremos la norma  $\|Y\|^* = \max_{(0 \leq t \leq t_f)} |Y(t)|$ . Una condición necesaria para asegurar la estabilidad es que  $\|q_1 - q_2\|^*$  pueda hacerse arbitrariamente pequeña eligiendo  $Y_1$  y  $Y_2$  de tal manera que  $\|Y_1 - Y_2\|^*$  sea suficientemente pequeña (Beck et al., 1985). Sin embargo, esta condición no siempre puede ser cumplida. Consideremos el caso excepcional donde  $Y_2(t) = Y_1(t) + \beta^{-1} \cos(\beta^2 t)$ ,  $\beta > 0$ , siendo  $Y_1(t)$  una función arbitraria. Vemos que el término de error  $\beta^{-1} \cos(\beta^2 t)$  puede hacerse suficientemente pequeño utilizando un valor grande de  $\beta$ . Esto fuerza que  $Y_1$  y  $Y_2$  estén arbitrariamente cerca en términos de la norma previamente definida:

$$\|Y_1 - Y_2\|^* = \max_{0 \leq t \leq t_f} \left| \frac{1}{\beta} \cos(\beta^2 t) \right| = \frac{1}{\beta}.$$

Sin embargo, las soluciones  $q_1$  y  $q_2$  pueden no estar cerca entre sí en absoluto. La diferencia entre  $q_1$  y  $q_2$  puede obtenerse siguiendo un análisis similar al expuesto por Beck et al. (1985), quedando

$$q_1 - q_2 = \frac{1}{\beta} \cosh\left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right) \cos\left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right),$$

por lo tanto la diferencia en la norma considerada es

$$\|q_1 - q_2\|^* \geq \frac{1}{\beta} \cosh\left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right) \cos\left(\frac{\beta}{\sqrt{2}}\right),$$

la cual deriva en  $(2\beta)^{-1} \exp(2^{-1/2}\beta) \rightarrow \infty$  cuando  $\beta \rightarrow \infty$ . Esto quiere decir que, para el caso especial considerado, diferencias arbitrariamente pequeñas en las temperaturas de entrada originan diferencias arbitrariamente amplias en el flujo de calor superficial. En consecuencia, la solución (2.4) es inestable frente a errores en los datos de entrada.

En la próxima sección se analizarán algunos conceptos y fundamentos matemáticos relacionados a los problemas inversos lineales dado que su nivel de complejidad permite comprender más fácilmente la esencia de los problemas inversos. Al final del capítulo se brindará una breve observación teórica de los problemas inversos no lineales.

### 2.3. Modelo matemático del problema inverso

El estudio de los problemas inversos lineales comienza con la definición de un modelo matemático para el problema directo. Sea  $\mathcal{A}$  el *mapeo directo*, el cual definimos conceptualmente como  $\mathcal{A}(\text{causa}) = \text{efecto}$ . La buena colocación característica de los problemas directos promueve que  $\mathcal{A}$  sea una función bien definida, unívoca, y continua. Por otra parte, el problema inverso resultará mal colocado si el mapeo  $\mathcal{A}^{-1}$  no existe o no es continuo, lo cual implica el incumplimiento de una o más de las tres condiciones de [Hadamard \(1902\)](#) para  $\mathcal{A}^{-1}$ .

Consideremos dos espacios de Hilbert  $X$  y  $W$  que denominaremos *espacio modelo* y *espacio de datos*, respectivamente, y el mapeo directo previamente mencionado  $\mathcal{A} : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \rightarrow W$ , donde  $\mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset X$  es el dominio de definición del operador lineal  $\mathcal{A}$ . El modelo matemático general del problema inverso lineal ([Mueller y Siltanen, 2012](#); [Vogel, 2002](#); [Engl et al., 1996](#)) puede ser escrito como

$$b = \mathcal{A}f + \varepsilon, \tag{2.6}$$

donde  $b \in W$  representa las *mediciones indirectas* y  $f \in \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset X$  la cantidad de interés, mientras que  $\varepsilon$  modela el error proveniente del ruido en las mediciones, el cual es inevitable en la práctica. Usualmente, se considera que  $\varepsilon$  es un error determinístico aunque desconocido, el cual es concebido como una variable aleatoria. La única información relacionada al error es la cota  $\|\varepsilon\| \leq \delta$ , siendo  $\delta$  una constante positiva que depende de la precisión del instrumento y del proceso de medición empleado. La figura 2.2 muestra una representación esquemática del mapeo directo y de sus principales características.



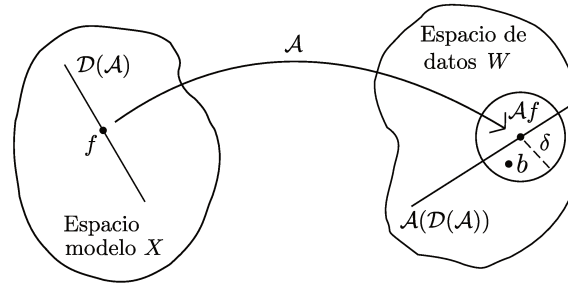


Figura 2.2: Representación esquemática del mapeo directo

En el caso de un problema directo, el objetivo es determinar  $b$  dados  $f$  y la regla  $\mathcal{A}$  que relaciona ambas cantidades, asumiendo que  $f$  puede ser medida directamente. Sin embargo, en el caso de un problema inverso, el interés es conocer la cantidad  $f$  (la cual no puede ser medida directamente) estando disponible para medir la cantidad física  $b$ . Aquí cobra sentido la expresión *medición indirecta* utilizada previamente. La formulación del problema inverso puede expresarse, entonces, como: **“Dada una medición afectada por ruido de la forma  $b = \mathcal{A}f + \varepsilon$  y  $\delta > 0$ , con  $\|\varepsilon\| \leq \delta$ , extraer alguna información de  $f$ ”**.

### 2.3.1. Herramientas analíticas

Es común encontrar que el modelo (2.6) responde a una ecuación integral del primer tipo (Mueller y Siltanen, 2012). Por ejemplo, la ecuación integral de Fredholm en el dominio unidimensional  $0 \leq x \leq L$  (Polyanin y Manzhirov, 2008) tiene la forma

$$(\mathcal{A}f)(x) \equiv \int_a^b K(x, y) f(y) dy, \quad (2.7)$$

donde  $K$  es la función conocida como el *núcleo* del operador integral. En problemas térmicos transientes, por ejemplo, una expresión similar a la (2.7) puede encontrarse en el modelado de la temperatura en todo el dominio en el instante de tiempo final  $t_f$  a partir del conocimiento de la distribución inicial de temperaturas  $f(y)$  (Mueller y Siltanen, 2012). Otro ejemplo es la ecuación integral de convolución de Volterra del primer tipo (Lamm, 1995), la cual adopta la siguiente expresión en el dominio  $0 \leq t \leq t_f$  (Polyanin y Manzhirov, 2008):

$$(\mathcal{A}f)(t) \equiv \int_0^{t_f} K(t-s) f(s) dy = K(t) * f(t), \quad (2.8)$$

donde  $K(t) * f(t)$  representa la convolución entre el núcleo  $K(t)$  y la función  $f(t)$ . Retornando al ámbito de problemas térmicos transientes, una expresión de la forma (2.8) puede encontrarse en el modelado del flujo de calor en la frontera de un cuerpo a partir de mediciones de temperatura disponibles en un punto interior del mismo (Beck et al., 1985).

En el estudio de los modelos matemáticos continuos de problemas inversos emergen una serie de conceptos y definiciones fundamentales para analizar sus características principales. Las cuestiones relacionadas a la existencia, unicidad y dependencia continua con respecto a los datos puede ser analizada de manera directa recurriendo a conceptos de análisis funcional aplicado a los espacios de Hilbert  $X$  y  $W$ , al operador  $\mathcal{A}$ , y a la relación entre ellos, incluyendo el estudio de la acotación y continuidad<sup>1</sup> de  $\mathcal{A}$ , el análisis de su compacidad<sup>2</sup>, y de los sub-espacios asociados<sup>3</sup>. En este sentido, por ejemplo, un operador lineal  $\mathcal{A} : X \rightarrow W$  para el cual  $\text{Im}(\mathcal{A})$  es de dimensión finita, es compacto (Vogel, 2002; Engl et al., 1996; Mueller y Siltanen, 2012). En este escenario, denominamos como  $\mathcal{K}$  al operador lineal  $\mathcal{A}$  para enfatizar su compacidad. A su vez, cualquier operador compacto es acotado. En particular, los operadores matriciales son compactos en virtud de estar definidos en espacios de dimensión finita. Es un hecho que prácticamente todos los operadores integrales lineales que modelan el problema directo como los definidos por las expresiones (2.7) y (2.8) son compactos, y que en tal caso, son acotados y continuos. En términos físicos, un operador lineal compacto  $\mathcal{K}$  genera un potente efecto de suavizado (Engl et al., 1996), es decir que  $\mathcal{K}$  amortigua las componentes de alta frecuencia presentes en  $f$  de manera que  $\mathcal{K}f$  es sustancialmente más suave que  $f$ .

Consideremos ahora el operador compacto  $\mathcal{K}$  que actúa entre los espacios de Hilbert de dimensión infinita  $X$  y  $W$ . Si  $\text{Im}(\mathcal{K})$  es también infinita, entonces la expresión  $b = \mathcal{K}f$  se encuentra mal colocada. De esta manera, se produce la violación de las condiciones de acotación y continuidad de la inversa  $\mathcal{K}^{-1}$  y, por ende, de las condiciones de Hadamard (1902). Entonces, el amortiguamiento mencionado previamente de las componentes de alta frecuencia no tiene lugar en los problemas inversos mal colocados, como se pudo observar al final de la sección 2.2.2.

Existe una estrecha relación entre algunas de las características previamente mencionadas y los conceptos de *solución de mínimos cuadrados*, *solución de mínimos cuadrados de norma mínima*, *inversa generalizada de Moore-Penrose*, *ecuaciones normales*, y *sistemas singulares*. El tratamiento detallado de estos conceptos y su interrelación en problemas continuos, la cual puede encontrarse en varios trabajos bibliográficos (Mueller y Siltanen, 2012; Vogel, 2002; Engl et al., 1996), se encuentra fuera de los objetivos de esta Tesis. No obstante, a continuación se presenta una breve reseña de los mismos que resulta útil en el contexto de problemas inversos discretos.

<sup>1</sup>Un mapeo lineal  $\mathcal{A}$  desde un espacio normado  $X$  hacia otro espacio normado  $W$  es acotado si existe un  $c \geq 0$  tal que  $\|\mathcal{A}x\| \leq c\|x\|$ , para todo  $x \in X$ . La norma de este mapeo lineal acotado se define como  $\|\mathcal{A}\| = \sup_{\|x\|=1} \|\mathcal{A}x\|$ . A su vez, la acotación implica continuidad.

<sup>2</sup>Un operador  $\mathcal{K} : \mathcal{D}(\mathcal{K}) \subset X \rightarrow W$  es compacto si y sólo si para cada secuencia acotada  $\{x_n\}$  en  $\mathcal{D}(\mathcal{K})$ ,  $\{\mathcal{K}x_n\}$  posee una sub-secuencia convergente. Otra forma de indicar esto es decir que el operador  $\mathcal{K}$  es compacto si y sólo si la imagen de cualquier conjunto acotado es un conjunto relativamente compacto (es decir, la clausura de tal imagen es un sub-conjunto compacto de  $W$ ).

<sup>3</sup>En particular se analiza la dimensión del espacio imagen  $\text{Im}(\mathcal{A})$  y la trivialidad del espacio nulo  $\text{Null}(\mathcal{A})$ . En problemas bien colocados, se cumple que  $\text{Im}(\mathcal{A})$  es de dimensión finita y que  $\text{Null}(\mathcal{A}) = \{0\}$ . En tal caso, el operador  $\mathcal{A}^{-1}$  existe y es lineal.

### 2.3.2. Planteo discreto

Una manera práctica y eficiente de resolver un problema modelado según la ecuación continua (2.6) es mediante el planteo de una aproximación discreta, la cual puede conseguirse a través de métodos numéricos o computacionales (Mueller y Siltanen, 2012). En este contexto, podemos suponer que las mediciones  $b$  provienen de un proceso de medición que provee valores discretos, los cuales son agrupados en el vector  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^p$ . En consecuencia, debemos introducir una aproximación de dimensión finita para la función  $f$  como  $\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n$ . El modelo discreto de la expresión (2.6) puede expresarse como

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{f} + \mathbf{e}, \quad (2.9)$$

donde el operador  $\mathcal{A}$  es aproximado con una matriz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$  y  $\mathbf{e} \in \mathbb{R}^p$  es el vector de errores aleatorios. El cumplimiento de las condiciones de Hadamard (1902) en el caso discreto puede analizarse estudiando directamente la matriz  $\mathbf{A}$ . Por ejemplo, la no unicidad de la solución es una característica de los problemas de rango deficiente<sup>4</sup> dado que, en tal caso, la matriz  $\mathbf{A}$  posee un espacio nulo<sup>5</sup> no trivial (Aster et al., 2018). Por su parte, la inestabilidad de la solución está relacionada al mal condicionamiento de la matriz  $\mathbf{A}$  (más adelante se expondrán mayores detalles de esta aseveración).

Una forma práctica de analizar problemas de rango deficiente es mediante la *descomposición en valores singulares* (o SVD, por sus siglas en inglés) de  $\mathbf{A}$ . Los fundamentos matemáticos que permiten hallar esta descomposición discreta derivan de la *expansión en valores singulares* (o SVE, por sus siglas en inglés) aplicada a la ecuación continua (2.6) (Mueller y Siltanen, 2012; Engl et al., 1996; Vogel, 2002). Se define la SVD de  $\mathbf{A}$  como

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{D}\mathbf{V}^T, \quad (2.10)$$

donde  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{p \times p}$  y  $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  son matrices ortogonales y  $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{p \times n}$  es una matriz diagonal cuyos elementos denotamos como  $d_j$ . Denotando como  $\mathbf{I}_p$  y  $\mathbf{I}_n$  a las matrices identidad de tamaños  $p \times p$  y  $n \times n$  respectivamente, la ortogonalidad de las matrices  $\mathbf{U}$  y  $\mathbf{V}$  se define como

$$\mathbf{U}^T\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^T = \mathbf{I}_p, \quad \text{y} \quad \mathbf{V}^T\mathbf{V} = \mathbf{V}\mathbf{V}^T = \mathbf{I}_n, \quad (2.11)$$

A su vez, se definen los *vectores singulares*  $\mathbf{u}_j$  y  $\mathbf{v}_j$ .  $\mathbf{u}_j$  representa las columnas de  $\mathbf{U}$ , y constitu-

<sup>4</sup>Siendo  $\mathbf{A}$  una matriz de  $p \times n$ , se define la imagen  $\text{Im}(\mathbf{A})$  como el conjunto de los vectores  $\mathbf{b}$  tales que la ecuación  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$  tenga al menos una solución. El espacio en columnas o rango de  $\mathbf{A}$ , denotado como  $\text{Rank}(\mathbf{A})$ , corresponde a la dimensión de la imagen de  $\mathbf{A}$ , es decir:  $\text{Rank}(\mathbf{A}) = \dim(\text{Im}(\mathbf{A}))$ . En otras palabras, el espacio en columnas es el conjunto de vectores  $\mathbf{b}$  que pueden ser escritos como una combinación lineal de las columnas de  $\mathbf{A}$ . Los problemas de rango deficiente ocurren cuando  $\text{Rank}(\mathbf{A}) < \min(p, n)$ .

<sup>5</sup>El espacio nulo de  $\mathbf{A}$ , denotado como  $\text{Null}(\mathbf{A})$ , es el conjunto de los vectores  $\mathbf{x}$  para los cuales  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}$ .

yen una base unitaria que genera el espacio de datos  $\mathbb{R}^p$ ; por otra parte,  $\mathbf{v}_j$  representa las columnas de  $\mathbf{V}$ , y constituyen una base unitaria que genera el espacio modelo  $\mathbb{R}^n$  (Aster et al., 2018). Los elementos diagonales  $d_j$ , conocidos como *valores singulares* de  $\mathbf{A}$ , son no negativos y se encuentran en orden decreciente:

$$d_1 \geq d_2 \geq \dots \geq d_{\min(p,n)} \geq 0,$$

donde se observa que todos o algunos de los valores  $d_j$  pueden ser cero. Se denomina *sistema singular* a la triada formada por el conjunto  $\{\mathbf{u}_j, d_j, \mathbf{v}_j\}$ , cuyos elementos cumplen las ecuaciones

$$\mathbf{A}\mathbf{v}_j = d_j\mathbf{u}_j, \quad (2.12a)$$

$$\mathbf{A}^T\mathbf{u}_j = d_j\mathbf{v}_j, \quad (2.12b)$$

que muestran la relación entre los vectores y valores singulares de  $\mathbf{A}$ .

### Soluciones de mínimos cuadrados, norma mínima y matriz inversa generalizada

Consideremos el sistema de ecuaciones inconsistente  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$ , en el que  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{p \times n}$  ( $p > n$ ) posee rango completo en columnas. Denotaremos este caso como “caso C1”. Si bien no existe solución para dicho sistema, puede resultar útil hallar una solución aproximada. Una medida natural de la calidad de tal aproximación es la norma-2 de la diferencia entre  $\mathbf{A}\mathbf{f}$  y  $\mathbf{b}$ . Se define, entonces, la *solución de mínimos cuadrados* de  $\mathbf{A}$  como la expresión

$$\min_{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n} \|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2 = \min_{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n} \{(\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b})^T(\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b})\}, \quad (2.13)$$

que minimiza la suma del cuadrado de los residuos. Denotaremos como  $\mathbf{f}^* \in X$  a la solución de mínimos cuadrados de  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$  si  $\|\mathbf{A}\mathbf{f}^* - \mathbf{b}\|^2 = \inf\{\|\mathbf{A}\mathbf{g} - \mathbf{b}\|^2 / \mathbf{g} \in X\}$  (Engl et al., 1996). En la práctica,  $\mathbf{f}^*$  puede ser obtenida proyectando  $\mathbf{b}$  en el espacio  $\text{Im}(\mathbf{A})$  (Aster et al., 2018), dado que  $\mathbf{b}$  no pertenece a tal espacio. Se demuestra que de dicha proyección surge que  $\mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{f}^* - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$ , más comúnmente expresada con el sistema de ecuaciones

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})\mathbf{f}^* = \mathbf{A}^T\mathbf{b}, \quad (2.14)$$

al cual nos referimos como el conjunto de *ecuaciones normales* para el problema de mínimos cuadrados. De hecho, existe una solución cerrada que puede obtenerse de este conjunto haciendo  $\mathbf{f}^* = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{b}$ , dado que partimos de la hipótesis que  $\mathbf{A}$  posee rango completo en columnas,

con lo cual la matriz  $(\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1}$  existe.

Sin embargo, pueden ocurrir dos casos adicionales denotados como C2 y C3: caso C2) que  $\mathbf{A}$  sea una matriz “gruesa” ( $p < n$ ) con rango completo en filas; y caso C3) que  $\mathbf{A}$  sea de rango deficiente. En ambos casos, la inversa de  $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$  que aparece en las ecuaciones normales (2.14) no existe. No obstante, aún es posible computar una solución para el sistema  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$ , la cual denominaremos como  $\mathbf{f}^\dagger$ . Para ello, introducimos el siguiente concepto complementario: “ $\mathbf{f}^\dagger \in X$  es denominada *solución de mínimos cuadrados de norma mínima de  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$*  si  $\|\mathbf{f}^\dagger\|^2 = \inf\{\|\mathbf{g}^*\|^2\}$  tal que  $\mathbf{g}^*$  sea una solución de mínimos cuadrados de  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$ ” (Engl et al., 1996). La solución de mínimos cuadrados de norma mínima, también conocida como la *mejor solución aproximada* de  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$ , está dada por

$$\mathbf{f}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b}, \quad (2.15)$$

donde  $\mathbf{A}^\dagger$  es la *matriz inversa generalizada o pseudo-inversa de Moore-Penrose* de  $\mathbf{A}$ , que resulta ser el operador solución del mapeo de  $\mathbf{b}$  hacia la mejor solución aproximada de  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$ . Una de las propiedades más destacables de la matriz inversa generalizada  $\mathbf{A}^\dagger$  es que siempre existe, y por lo tanto también la solución aproximada  $\mathbf{f}^\dagger$  (Aster et al., 2018). Para cada uno de los casos C1-C3 ocurre que:

- C1: De la expresión (2.14) se comprueba que  $\mathbf{A}^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^T$  (matriz pseudo-inversa derecha), con lo cual la solución de mínimos cuadrados coincide con la solución de norma mínima,  $\mathbf{f}^\dagger \equiv \mathbf{f}^*$ .
- C2: Se comprueba que  $\mathbf{f}^\dagger = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-1} \mathbf{b}$ , donde  $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \mathbf{A}^T)^{-1}$  (matriz pseudo-inversa izquierda), con lo cual  $\mathbf{f}^\dagger$  es una solución de mínimos cuadrados cuya norma es mínima.
- C3:  $\mathbf{f}^\dagger$  provee una solución que minimiza simultáneamente las normas  $\|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2$  y  $\|\mathbf{f}\|^2$ .

En la práctica, el cómputo de la matriz inversa generalizada se realiza mediante la descomposición SVD de  $\mathbf{A}$ . Operando algebraicamente, se demuestra que la solución al problema de estimación de  $\mathbf{f}$  está dado por la expresión

$$\mathbf{f}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b} = \mathbf{V} \mathbf{D}^\dagger \mathbf{U}^T \mathbf{b} = \sum_{j=1}^z \frac{\mathbf{u}_j^T \mathbf{b}}{d_j} \mathbf{v}_j, \quad (2.16)$$

donde

$$\mathbf{D}^\dagger = \begin{pmatrix} 1/d_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/d_2 & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & & \\ & & & 1/d_z & & \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & & \cdots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times p},$$

siendo  $z$  el índice más grande para el cual su correspondiente valor singular es no nulo:

$$z = \max_{(p,n)} \{j \mid 1 \leq j \leq \min, d_j > 0\}.$$

La inestabilidad de la solución obtenida mediante el cómputo de la matriz inversa generalizada puede analizarse examinando los valores singulares de  $\mathbf{A}$ : si entre ellos existen algunos muy pequeños, la solución se torna extremadamente sensible frente a la presencia de ruido en el vector de datos  $\mathbf{b}$ . En la expresión (2.16) observamos que si  $d_j \rightarrow 0$ , la matriz diagonal inversa  $\mathbf{D}^\dagger$  contiene números de punto flotante de tamaños muy diversos, lo cual lleva a una amplificación incontrolable de los errores de truncamiento (Mueller y Siltanen, 2012; Aster et al., 2018). Una manera de cuantificar el grado de inestabilidad es mediante el *número de condición*  $\text{Cond}(\mathbf{A})$  de la matriz  $\mathbf{A}$ , definido como

$$\text{Cond}(\mathbf{A}) := \frac{d_1}{d_z}, \quad (2.17)$$

siendo válida esta expresión cuando  $\mathbf{A}$  es de rango completo. En caso que  $\mathbf{A}$  sea de rango deficiente, el número de condición es efectivamente infinito (Aster et al., 2018).

### Descomposición SVD truncada

Una manera de mitigar la inestabilidad numérica dada por la presencia de valores singulares de  $\mathbf{A}$  muy próximos a cero, es utilizando la *descomposición en valores singulares truncada*, o TSVD por sus siglas en inglés. Entonces, para cualquier  $\alpha > 0$  se define la TSVD como  $\mathbf{A}_\alpha^\dagger = \mathbf{V}\mathbf{D}_\alpha^\dagger\mathbf{U}^\text{T}$ ,

donde

$$\mathbf{D}_\alpha^\dagger = \begin{pmatrix} 1/d_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1/d_2 & & & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & & \\ & & & 1/d_{z_\alpha} & & \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & & & \cdots & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times p}, \quad (2.18)$$

siendo

$$z_\alpha = \min\{r, \max\{j | 1 \leq j \leq \min_{(p,n)} d_j > \alpha\}\},$$

es decir que el índice  $z_\alpha$  será a lo sumo igual a  $r$ . En consecuencia, se puede definir la función de reconstrucción  $\mathbf{f}_\alpha^\dagger$  mediante la fórmula

$$\mathbf{f}_\alpha^\dagger = \mathbf{V}\mathbf{D}_\alpha^\dagger\mathbf{U}^T\mathbf{b} = \sum_{i=1}^{z_\alpha} \frac{\mathbf{u}_i^T\mathbf{b}}{d_i} \mathbf{v}_i. \quad (2.19)$$

La eliminación de vectores del espacio modelo asociados con valores singulares muy pequeños induce mayor estabilidad en la solución. Sin embargo, esta ganancia se produce a expensas de reducir la dimensión del sub-espacio de  $\mathbb{R}^n$  donde yace la solución (Aster et al., 2018).

Los métodos presentados pueden ser empleados para analizar cualquier problema inverso. Sin embargo, existen algunas estrategias de análisis particularmente útiles para el problema térmico inverso discreto, la mayoría de las cuales fueron planteadas y exhaustivamente desarrolladas por Beck et al. (1985). A continuación se brindará una breve reseña de ellas.

## 2.4. Detalles del modelo matemático en problemas térmicos

En el ámbito de transferencia de calor, la aplicación del teorema de Duhamel (Beck et al., 1985) permite hallar soluciones aproximadas en el caso de problemas lineales (es decir, con parámetros termo-físicos independientes de la temperatura). La forma matemática de tales soluciones responde a una ecuación integral de convolución de Volterra del primer tipo (Lamm, 1995). En la publicación de Tourn et al. (2021b), reproducida en el anexo B, los autores verifican la semejanza de las expresiones derivadas mediante el uso de métodos numéricos para la resolución del IHCP con aquellas que se muestran a continuación.

### 2.4.1. Teorema de Duhamel

El teorema de Duhamel es consecuencia del principio de superposición, siendo solamente válido para casos lineales. El teorema emplea una solución tipo “bloque de construcción” (Beck et al., 1985) la cual se utiliza junto al principio de superposición para obtener la temperatura en cualquier ubicación e instante de tiempo. Una de tales soluciones,  $\phi(x_s, t)$ , corresponde al incremento de temperatura en el punto  $x_s$  de un cuerpo debido al flujo de calor tipo Heaviside dado por

$$q(t) = \begin{cases} 0 & \text{para } t < 0 \\ 1 & \text{para } t > 0, \end{cases}$$

asumiendo que las propiedades termo-físicas del cuerpo en cuestión son independientes de la temperatura. En relación al problema de transferencia de calor en un placa de espesor  $L$  como el presentado al inicio de la sección 2.2 (problema PD1),  $\phi(x, t)$  coincide con la solución exacta (2.2) considerando  $q_c = 0$  para  $t < 0$  y  $q_c = 1$  para  $t > 0$ .

Consideremos que el flujo superficial  $q_c$  que actúa sobre la cara izquierda de la placa es ahora un flujo dependiente del tiempo  $q(t)$ . La función que representa dicho flujo es aproximada mediante una discretización del dominio temporal en  $M$  intervalos definidos por los instantes de tiempo  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_M$  (ver figura 2.3). Los flujos de calor correspondientes a cada intervalo son  $q_1, q_2, \dots, q_M$ . Utilizando el principio de superposición, y operando algebraicamente (Beck et al., 1985) en el límite cuando  $\Delta t \rightarrow 0$ , se llega a la siguiente expresión del teorema de Duhamel:

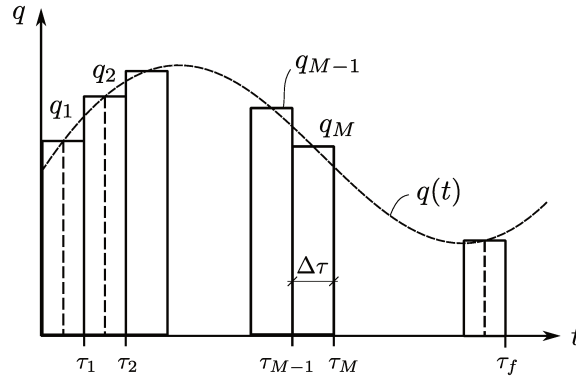
$$T(x_s, t) = T_0 + \int_0^t \frac{\partial \phi(x_s, t - \tau)}{\partial t} q(\tau) d\tau, \quad (2.20)$$

en la que se aprecia la convolución entre las dos funciones del integrando dada la dependencia de una con respecto a  $t - \tau$  y la otra con  $\tau$ . Teniendo en cuenta lo mencionado en la sección 2.3, podemos reescribir la ecuación (2.20) como

$$(\mathcal{A}f)(x_s, t) \equiv \int_0^t \frac{\partial \phi(x_s, t - \tau)}{\partial t} q(\tau) d\tau = T(x_s, t) - T_0 \equiv b,$$

la cual tiene la misma forma que la ecuación (2.8) definida en la sección 2.3.1, con un núcleo de convolución  $K(x_s, t - \tau) = \partial \phi(x_s, t - \tau) / \partial t$ . El problema de estimar  $q(t)$  es, entonces, un problema mal condicionado de de-convolución (Vogel, 2002; Beck et al., 1985). El mal condicionamiento en este caso está relacionado al hecho de que  $\mathcal{A}^{-1}$  es no acotado siempre que el rango de  $\mathcal{A}$  no sea cerrado (Lamm, 1995).





**Figura 2.3:** Discretización del flujo transiente  $q(t)$ . Nótese que en cada intervalo de tiempo el valor del flujo adoptado corresponde al valor calculado en el punto medio del intervalo. Por ejemplo,  $q_M = \frac{1}{2}(q(\tau_M) + q(\tau_{M-1}))$ .

### 2.4.2. Expresión discreta

Dado que el flujo de calor es supuesto constante en cada paso de tiempo, la versión discreta de la integral de Duhamel en el punto  $x$  puede expresarse como

$$\Theta_M \equiv T(x_s, t_M) = T_0 + \sum_{m=1}^M q_m \Delta\phi_{M-m},$$

donde  $q_m$  es la función  $q(t)$  evaluada en  $t = t_m$  y  $\Delta\phi_{M-m} \equiv \Delta\phi_i = \phi_{i+1} - \phi_i$  (Beck et al., 1985). Entonces, la forma matricial de la expresión discreta de la integral de Duhamel puede escribirse como

$$\Theta = \mathbf{X}\mathbf{q} + T_0\mathbf{1}, \quad (2.21)$$

donde  $\Theta = [\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_M]^T$  es un vector columna que contiene las temperaturas en cada instante de tiempo en la posición espacial  $x_s$ ,  $\mathbf{q} = [q_1, q_2, \dots, q_M]^T$  es otro vector columna cuyas componentes son los valores desconocidos del flujo de calor en los intervalos de tiempo correspondientes,  $\mathbf{1}$  es un vector columna cuyos componentes son todos unos, y  $\mathbf{X}$  es la matriz dada por

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \Delta\phi_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta\phi_1 & \Delta\phi_0 & 0 & \cdots & 0 \\ \Delta\phi_2 & \Delta\phi_1 & \Delta\phi_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta\phi_M & \Delta\phi_{M-1} & \Delta\phi_{M-2} & \cdots & \Delta\phi_0 \end{pmatrix}, \quad (2.22)$$

la cual posee un aspecto de matriz Toeplitz triangular inferior (Engl et al., 1996; Vogel, 2002), también denominada *matriz circulante*, la cual es común de hallar en la discretización de sistemas caracterizados por ecuaciones integrales de Volterra de convolución del primer tipo (Eldén, 1984;

Hansen, 2005).

La expresión (2.21) no sólo representa la forma discreta de la ecuación de Duhamel, sino que también la ecuación lineal que se obtendría al utilizar formulaciones numéricas de diferencias o elementos finitos para resolver el problema térmico transiente (Beck et al., 1985). Esto implica que los algoritmos de resolución del IHCP serán independientes de la aproximación numérica empleada para resolver dicho problema transiente.

### 2.4.3. Coeficientes de sensibilidad

Las componentes de la matriz  $\mathbf{X}$  corresponden a la derivada primera de la temperatura respecto al flujo de calor, es decir

$$X_{ij} \equiv X_j(\Theta_i) = \frac{\partial \Theta_i}{\partial q_j} = \begin{cases} \Delta \phi_{i-j}, & i \geq j \\ 0, & i < j. \end{cases} \quad (2.23)$$

las cuales son también identificadas como *coeficientes de sensibilidad*. Se aprecia que dichas cantidades son cero para los casos donde  $j > i$ , indicando así que la temperatura  $\Theta_i$  en el  $i$ -ésimo instante de tiempo es independiente de componentes de flujo de calor  $q_j$  futuras, lo cual rubrica el razonamiento lógico. El trabajo de Tourn et al. (2021b), reproducido en el anexo B, pone de manifiesto que el empleo del método de elementos finitos para discretizar las ecuaciones de gobierno del problema térmico transiente conduce a un idéntico resultado al computar la matriz de sensibilidad. De esta manera, resulta evidente que el abordaje del problema en cuestión desde distintos enfoques (teorema de Duhamel o por métodos numéricos) resulta indistinto.

El estudio de los coeficientes de sensibilidad permite comprender e identificar características particulares de un proceso de transferencia de calor. Por ejemplo, si los coeficientes son muy pequeños o están muy correlacionados, el problema de estimación resulta muy difícil de resolver y muy sensible a errores en las mediciones (Beck et al., 1985; Beck y Woodbury, 2016). En este contexto, el determinante de la matriz  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  es próximo a cero, lo cual indica que  $\mathbf{X}^T \mathbf{X}$  es casi-singular. Si bien dicha matriz sería numéricamente invertible, el resultado de tal operación no resulta fiable debido a la extrema sensibilidad con respecto a pequeñas perturbaciones (Ozisik, 2000; Beck et al., 1985).

Para hallar expresiones explícitas de los coeficientes de sensibilidad, es necesario derivar tanto la ecuación de gobierno (2.1a) como las de valores iniciales (2.1b) y (2.1c) y de contorno (2.1d) que describen matemáticamente el problema térmico. Consideremos nuevamente el problema PD1, pero con un flujo de calor  $q_c$  compuesto por una sucesión de valores discretos  $q_1, q_2, \dots, q_M$ . Se deben derivar todas las ecuaciones del conjunto (2.1) con respecto a  $q_j$ . Se demuestra (Beck

et al., 1985) que el coeficiente de sensibilidad adimensional para la componente  $q_1$ , cuyo valor es  $q_c = q_1$  en el intervalo  $0 < t < t_1 = \Delta t$  y  $q_c = 0$  para  $t > t_1$ , puede ser expresado como

$$X_1^* \equiv \frac{\kappa}{L} \frac{\partial T}{\partial q_c} = \begin{cases} T^*(x^*, t^*), & 0 < t^* < \Delta t^* \\ T^*(x^*, t^*) - t^*(x^*, t^* - \Delta t^*), & t^* > \Delta t^* \end{cases} \quad (2.24)$$

donde  $\Delta t^* \equiv \nu \Delta t / L^2$ , siendo  $\Delta t$  el período de tiempo en el cual actúa  $q_1$ . Los coeficientes correspondientes a las demás componentes tienen la misma forma pero desplazada en  $\Delta t$ , con lo cual no es necesario analizarlos. Para tiempos adimensionales grandes como  $t^* - \Delta t^* > 0,5$ , la segunda expresión en el conjunto (2.24) deriva en  $X_{1,\text{máx}}^* = \Delta t^*$  la cual es, por un lado, independiente de la posición y del tiempo, y por otro, dependiente de la duración del tiempo de calentamiento. Esto indica que, mientras más componentes del flujo de calor discreto quieran estimarse en un dominio temporal fijo, los coeficientes de sensibilidad se tornan cada vez más pequeños, dificultando la estimación de la función  $q(t)$ .

Los coeficientes de sensibilidad permiten determinar la linealidad del problema inverso. Si dichos coeficientes son independientes de las incógnitas, el problema de estimación es lineal. La resolución del problema inverso puede realizarse sin recurrir a métodos iterativos.

#### 2.4.4. Planteo discreto del problema térmico inverso

Hasta el momento sólo se presentaron y desarrollaron expresiones útiles para el estudio del problema directo enunciado al comienzo de la sección 2.2, denominado PD1. Sin embargo, aún resta enunciar de manera más específica el problema inverso correspondiente, el cual denotaremos como “problema PI1”. Formalmente, el PI1 puede expresarse mediante un sistema de ecuaciones idéntico al (2.1), excepto que la condición de borde en la frontera izquierda dada por la ecuación (2.1b) es ahora desconocida.

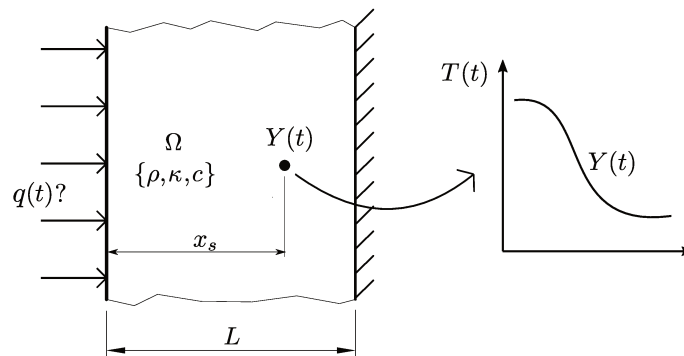


Figura 2.4: Configuración del problema inverso PI1.

Para compensar tal déficit de información, se dispone de una historia de temperaturas en el

punto interior  $s$  del dominio  $\Omega$ , a la que nos referiremos como  $Y(t)$ . Su equivalente discreto es el vector  $\mathbf{Y} = [Y_1, Y_2, \dots, Y_m, \dots, Y_M]^T$ , que contiene las temperaturas medidas en los instantes de tiempo  $t_1, t_2, \dots, t_m, \dots, t_M$ . De hecho, la historia  $Y(t)$  puede provenir no solo de una medición real obtenida, por ejemplo, mediante la instalación de una termocupla en la ubicación  $s$  (proceso que inherentemente conlleva ruido y errores), sino también de una simulación numérica. En tal caso, los datos generados son corrompidos artificialmente con ruido blanco para tener en cuenta los errores inherentes al proceso de medición. Ya sea que los datos provengan de una u otra fuente, supondremos que su desviación estándar  $\sigma$  es conocida. La figura 2.4 muestra las características principales del PI1.

El objetivo de las estrategias de cálculo inverso que se desarrollarán en el próximo capítulo es proponer una estimación discreta aceptable  $\hat{\mathbf{q}}$  del flujo de calor desconocido  $\mathbf{q}$  tal que, al reemplazarla en el lado derecho de la expresión (2.1b), el campo de temperaturas originado  $T(x_s, t; \hat{q}(t))$  (donde empleamos la notación  $T(\dots; \hat{q}(t))$  para enfatizar el hecho que el campo de temperaturas en el cuerpo es consecuencia del flujo de calor estimado  $\hat{q}(t)$ ) en la posición  $s$  cumpla la condición (Ozisik, 2000)

$$|T(x_s, t; \hat{q}(t)) - Y(t)| \approx \sigma, \quad (2.25)$$

para  $t \geq 0$ , la cual establece una discrepancia aceptable entre las temperaturas medidas y calculadas para el nivel de ruido  $\sigma$ . En el marco de la aproximación numérica considerada, el cómputo de las estimaciones  $\hat{\mathbf{q}}$  se lleva a cabo mediante un proceso de minimización de un funcional de mínimos cuadrados  $S$  (el cual provee una varianza mínima de las estimaciones en su norma correspondiente) como el definido por la expresión (2.13), el cual toma la forma

$$S(\hat{\mathbf{q}}) = \|\Theta(\hat{\mathbf{q}}) - \mathbf{Y}\|^2 = \|\mathbf{X}\hat{\mathbf{q}} - \mathbf{Y}^*\|^2, \quad (2.26)$$

donde se tuvo en cuenta la expresión (2.21) válida para el caso lineal, con  $\mathbf{Y}^* = \mathbf{Y} - T_0\mathbf{1}$ . Sin embargo, la inestabilidad de dicha formulación obliga al desarrollo de técnicas de regularización para mitigar tales efectos indeseables. En la próxima sección definiremos en mayor detalle el concepto de regularización, incluyendo los aspectos teóricos principales y la implementación de técnicas en problemas inversos discretos.

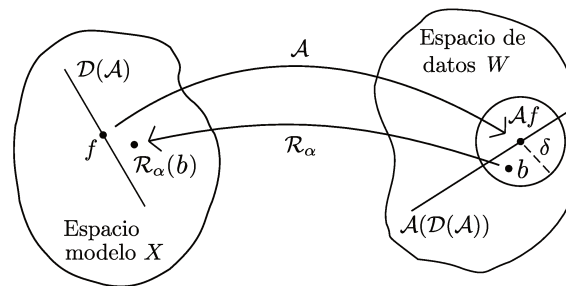
## 2.5. Regularización

Como mencionamos al principio de este capítulo, la regularización es la técnica empleada para tratar el mal condicionamiento de los problemas inversos. La formulación elemental del problema inverso relacionada a las mediciones indirectas (2.6) puede enunciarse como: “**Dadas las medi-**

ciones  $b$  y el parámetro  $\delta > 0$ , con  $b = \mathcal{A}f + \varepsilon$  y  $\|b - \mathcal{A}f\|_Y \leq \delta$ , reconstruir o extraer alguna información de  $f$ ” (Mueller y Siltanen, 2012).

Una forma en principio coherente de estimar  $f$  sería  $\mathcal{A}^{-1}b$ . Dado que  $b$  y  $\mathcal{A}f$  son cercanos entre sí, el punto  $f = \mathcal{A}^{-1}\mathcal{A}f$  debería estar cerca a  $\mathcal{A}^{-1}b$ . Sin embargo, este razonamiento sólo es válido para problema inversos bien colocados. En el caso de problemas inversos mal colocados, no existe ninguna función continua de  $W$  en  $X$  que permita mapear  $\mathcal{A}f \in W$  hacia  $f \in X$  debido al incumplimiento de una o más de una condiciones de Hadamard (1902). Por ello, no resulta inmediato el diseño de un método que realice el mapeo de  $b = \mathcal{A}f + \varepsilon$  hacia algún punto en  $X$  cercano a  $f$ .

En términos generales, la regularización es la aproximación de un problema mal colocado mediante una familia de problemas vecinos bien colocados (Engl et al., 1996). Matemáticamente, se materializa a través de i) una *estrategia de regularización*, y ii) de la *elección admisible de un parámetro de regularización*. La figura 2.5 muestra un esquema del concepto de regularización.



**Figura 2.5:** Esquema conceptual de la regularización de problemas inversos lineales.

Las reglas para determinar el parámetro de regularización pueden ser *a priori* o *a posteriori* (Vogel, 2002; Engl et al., 1996). Las primeras se caracterizan por requerir información previa respecto a la variable incógnita, la cual es improbable de disponer. En cambio, las reglas *a posteriori* dependen solamente de los datos sin contar con ninguna información respecto a la solución. Entre las segundas, podemos mencionar (Vogel, 2002; Engl et al., 1996; Alifanov, 1994; Mueller y Siltanen, 2012; Hansen, 2005) el principio de Morozov, los métodos de validación cruzada generalizada y de la curva L, entre otros. En cualquier caso, la aplicación de métodos de regularización implica hallar el balance apropiado entre estabilidad y precisión (Engl et al., 1996).

## 2.6. Estrategias de regularización en el enfoque discreto

Al emplear métodos numéricos para llevar a cabo los cálculos necesarios en espacios de dimensión finita, una forma posible de estabilización del problema inverso mal colocado dado por el modelo (2.6) es mediante lo que se conoce como *regularización por proyección* (Engl et al.,

1996). En dicha estrategia, la regularización es llevada a cabo de manera implícita solamente mediante la aproximación de dimensión finita, la cual se materializa por la discretización adoptada (por ejemplo, mediante el método de diferencias finitas o elementos finitos). Sin embargo, resulta necesario incorporar estrategias de regularización adicionales no sólo con el fin de estabilizar el algoritmo numérico, sino también para permitir el uso de sub-espacios más grandes en la discretización. Dichas estrategias son implementaciones para los casos discretos de dimensión finita de las técnicas desarrolladas para los modelos continuos de dimensión infinita.

En sus trabajos pioneros, Tikhonov y Arsenin (1977) y Phillips (1962) desarrollaron independientemente una estrategia de regularización que consiste en la incorporación de supuestos acerca del tamaño o la suavidad de la solución deseada mediante el uso de la norma  $\|\mathbf{f}\|^2$  (Hansen, 2005). De esta manera, el método desarrollado, denominado *regularización de Tikhonov-Phillips*, o simplemente *regularización de Tikhonov*, puede escribirse como

$$\hat{\mathbf{f}}_\alpha = \arg \min_{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n} \{ \|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha \|\mathbf{f}\|^2 \}, \quad (2.27)$$

donde se aprecia que la función de mínimos cuadrados  $\|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2$  ha sido aumentada por el término de penalidad  $\alpha \|\mathbf{f}\|^2$ , con lo cual esta estrategia puede interpretarse como un compromiso entre minimizar la norma del residuo manteniendo pequeña la norma- $L^2$  de  $\mathbf{f}_\alpha$ , con el fin de asegurar la estabilidad. A su vez, la expresión (2.27) puede adoptar las siguientes dos formas alternativas:

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{I}) \hat{\mathbf{f}}_\alpha = \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \quad (2.28a)$$

$$\hat{\mathbf{f}}_\alpha = \arg \min_{\mathbf{f} \in \mathbb{R}^n} \left\{ \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha} \mathbf{I} \end{pmatrix} \mathbf{f} - \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \right\|^2 \right\} \quad (2.28b)$$

siendo la (2.28a) la *forma regularizada de las ecuaciones normales* (2.14) y (2.28b) la denominada *forma apilada* de la expresión (2.27), en la que definimos  $\tilde{\mathbf{A}} = [\mathbf{A} \quad \sqrt{\alpha} \mathbf{I}]^T$  y  $\tilde{\mathbf{b}} = [\mathbf{b} \quad \mathbf{0}]^T$ . En esta última expresión alternativa, podemos observar que las últimas  $n$  columnas de la matriz  $\tilde{\mathbf{A}}$  son linealmente independientes, por lo cual la expresión (2.28b) constituye un problema de mínimos cuadrados de rango completo que puede resolverse por el método de ecuaciones normales (Aster et al., 2018), cuyo resultado es la expresión (2.28a).

Además de las formas alternativas (2.28) de la expresión (2.27), existen otras estrategias de regularización en el contexto discreto. Todas ellas pueden clasificarse en cuatro categorías (Vogel, 2002; Beck et al., 1985) de regularización: i) por filtrado; ii) por métodos variacionales; iii) por métodos iterativos; y iv) por pasos de tiempo futuros.

### 2.6.1. Regularización por filtrado

El concepto de filtrado se origina en el análisis de la solución que se obtiene mediante el cómputo de la matriz pseudo-inversa de  $\mathbf{A}$ . En la sección 2.3.2 se mostró que podían surgir inestabilidades en el cálculo de esta matriz debido a la división por valores singulares muy pequeños, generando que su número de condición se vuelva muy grande. Una forma de mitigar este inconveniente implica modificar los  $d_i^{-1}$  de la matriz  $\mathbf{D}^\dagger$  multiplicándolos por una función filtro de regularización  $w_\alpha(d^2)$  para la cual el producto  $w_\alpha(d^2)d_i^{-1} \rightarrow 0$  cuando  $d \rightarrow 0$ . El subíndice  $\alpha$  refiere a que el filtro es función del parámetro de regularización. La finalidad del filtro es dejar de lado las componentes singulares de  $\mathbf{A}^\dagger \mathbf{b}$  correspondientes a valores singulares pequeños y alcanzar una aproximación  $\mathbf{f}_\alpha^\dagger$  a la solución real con una representación

$$\mathbf{f}_\alpha^\dagger = w_\alpha(d_i^2) \mathbf{V} \mathbf{D}^\dagger \mathbf{U}^T \mathbf{b} = \sum_{i=1}^n \frac{w_\alpha(d_i^2)}{d_i} (\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}) \mathbf{v}_i. \quad (2.29)$$

Para obtener algún grado de exactitud, se deben retener las componentes singulares correspondientes a valores singulares grandes, lo cual se alcanza tomando  $w_\alpha(d^2) \approx 1$  para valores grandes de  $d^2$ .

#### Filtro TSVD

Un ejemplo de función filtro que cumple las características mencionadas al final del párrafo anterior es

$$w_\alpha(d^2) = \begin{cases} 1 & \text{si } d^2 > \alpha, \\ 0 & \text{si } d^2 \leq \alpha, \end{cases} \quad (2.30)$$

con el cual la aproximación (2.29) toma ahora la forma

$$\mathbf{f}_\alpha^\dagger = \sum_{d_i^2 > \alpha} d_i^{-1} (\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}) \mathbf{v}_i, \quad (2.31)$$

que resulta idéntica a la solución  $\mathbf{f}_\alpha^\dagger$  obtenida en (2.19). Es decir que la técnica de descomposición TSVD puede interpretarse como un método de filtrado donde el parámetro  $\alpha$  se elige arbitrariamente.

### Filtro de Tikhonov

Por su parte, el método de Tikhonov y Arsenin (1977) permite escribir una expresión particular de filtro dada por

$$w_\alpha(d^2) = \frac{d^2}{d^2 + \alpha}, \quad (2.32)$$

con lo cual la correspondiente versión regularizada de (2.29) resulta

$$\mathbf{f}_\alpha^\dagger = \sum_{i=1}^z \frac{d_i}{d_i^2 + \alpha} (\mathbf{u}_i^T \mathbf{b}) \mathbf{v}_i. \quad (2.33)$$

Luego, si introducimos en (2.33) la descomposición SVD de  $\mathbf{A}$  empleando las expresiones (2.12), obtenemos la expresión de la forma alternativa (2.28a).

Por último, cabe mencionar que el sistema de ecuaciones normales (2.28a) puede generalizarse (Mueller y Siltanen, 2012) haciendo

$$\mathbf{f}_\alpha^\dagger = (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L})^{-1} \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \quad (2.34)$$

donde  $\mathbf{L}$  es una matriz de diferenciación discreta cuya definición permite incorporar información de las derivadas del vector de incógnitas.

### 2.6.2. Regularización por métodos variacionales

Cuando se trata de sistemas mal condicionados de gran tamaño, resulta poco práctico implementar un esquema de regularización por filtrado dado que se requiere la descomposición SVD del operador matricial  $\mathbf{A}$ . Sin embargo, la expresión (2.27) puede computarse por métodos variacionales. Por ejemplo, sea el funcional cuadrático  $Q_\alpha : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  definido como  $Q_\alpha(\mathbf{f}) = \|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha \|\mathbf{f}\|^2$ . Se demuestra que  $Q_\alpha$  tiene un mínimo único para  $\alpha > 0$  (Mueller y Siltanen, 2012), el cual está dado por la forma variacional

$$\left\langle (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{I}) \hat{\mathbf{f}}_\alpha - \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \mathbf{w} \right\rangle = 0, \quad (2.35)$$

donde  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  representa el producto interno, y  $\mathbf{w}$  es un vector arbitrario en  $\mathbb{R}^n$ . Debido a esta última aseveración, necesariamente debe ocurrir

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{I}) \hat{\mathbf{f}}_\alpha = \mathbf{A}^T \mathbf{b}, \quad (2.36)$$

que es idéntica a la expresión alternativa (2.28a).



Vogel (2002) menciona que el empleo de métodos variacionales puede contar con otras ventajas: por ejemplo, es posible incluir restricciones de distinta naturaleza en función de la información disponible *a priori* con la que se cuente, implementando un algoritmo de optimización con restricciones. Por otro lado, permite utilizar otro tipo de funciones de penalidad tal como la función discreta de *variación total* (TV, por sus siglas en inglés) o la penalidad *lasso* (Aster et al., 2018).

### Penalización por variación total

El uso de la penalización TV ha sido ampliamente discutida y estudiada en relación a otros ámbitos de aplicación de problemas inversos tales como reconstrucción de imágenes y análisis de señales, entre otros. Sin embargo, no ha sido previamente empleada en la estimación de flujos de calor superficial en el contexto de IHCP lineales. El anexo B contiene la transcripción completa de la publicación de Tourn et al. (2021b), en la que los autores implementaron dicha estrategia en el contexto mencionado con el fin de explotar las posibilidades que ofrece para reconstruir funciones discontinuas de flujos de calor, los cuales son extremadamente difíciles de capturar utilizando penalizantes tradicionales. De hecho, el problema de reconstrucción de funciones de flujos de calor con formas discontinuas tipo escalera constituye un problema de referencia típico para la evaluación del desempeño de los métodos inversos propuestos.

En el caso unidimensional, si  $f$  es una función de valores reales definida en el intervalo  $[a, b]$ , la variación total de  $f$ , denotada como  $TV(f)$ , se define como

$$TV(f) = \sup \sum_{i=1}^M |f(x_i) - f(x_{i-1})|,$$

donde el supremo es sobre todas las particiones  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_k = b$  de  $[a, b]$ . Nótese que si  $f$  es continua a trozos con un número finito de discontinuidades de salto, entonces la variación total es la suma de las magnitudes de los saltos. Si  $f$  es diferenciable, haciendo  $\Delta x_i = x_i - x_{i-1}$ , queda

$$TV(f) = \sup \sum_{i=1}^M \frac{|f(x_i) - f(x_{i-1})|}{|x_i - x_{i-1}|} |x_i - x_{i-1}|,$$

y tomando límite cuando  $\Delta x_i \rightarrow 0$  resulta en

$$TV(f) = \int_a^b |f'(x)| dx.$$

La expresión de la función a minimizar en el contexto discreto, entonces, adquiere la forma

$$S_\alpha(\mathbf{f}) = \|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2 + \alpha\text{TV}(\mathbf{f}),$$

donde  $\text{TV}(\mathbf{f}) = \sum_{i=2}^M \Delta x_i \sqrt{\{[f(x_i) - f(x_{i-1})]/\Delta x_i\}^2 + \omega}$  es una aproximación dimensionalmente finita y diferenciable de la penalidad de variación total, y cuya suavidad es controlada por el parámetro  $\omega > 0$ . Restringiendo de esta forma el funcional de mínimos cuadrados se espera que la solución tenga menos oscilaciones y adopte una forma tipo escalera.

Los detalles de la implementación de la estrategia de regularización mediante la penalización TV para un problema inverso de conducción de calor lineal unidimensional, así como los resultados de su aplicación en varios casos de estudio donde también se implementó la estrategia de Tikhonov y Arsenin (1977), son discutidos por Tourn et al. (2021b). La transcripción completa de tal publicación puede encontrarse en el anexo B.

### 2.6.3. Regularización por métodos iterativos

Sea el siguiente funcional de mínimos cuadrados  $S(\mathbf{f}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b}\|^2$ , cuyo gradiente es  $\nabla S(\mathbf{f}) = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\mathbf{f} - \mathbf{b})$ . Los métodos iterativos con búsqueda lineal se basan en la definición de dos elementos: i) una dirección de búsqueda  $\mathbf{p}^{(k)}$ , y ii) una longitud  $\varphi$  a lo largo de tal dirección para la cual el valor de la función en la nueva iteración sea inferior al valor previo. El esquema iterativo viene dado por la expresión

$$\mathbf{f}^{(k+1)} = \mathbf{f}^{(k)} + \varphi\mathbf{p}^{(k)}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

con la cual debe cumplirse que  $S(\mathbf{f}^{(k+1)}) < S(\mathbf{f}^{(k)})$ . La dirección de búsqueda debe ser tal que en cada iteración se cumpla la propiedad de descenso  $\nabla S(\mathbf{f}^{(k)})^T \mathbf{p}^{(k)} < 0$ . Por ejemplo, el método de descenso más pronunciado emplea la dirección opuesta al gradiente  $\mathbf{p}^{(k)} = -\nabla S(\mathbf{f}^{(k)})$ , la cual resulta intuitiva. Sin embargo, la tasa de convergencia de este método es, en general, extremadamente lenta. Por otra parte, la elección del paso de búsqueda puede llevarse a cabo resolviendo el problema de minimización unidimensional  $\min_{\varphi} S(\mathbf{f}^{(k)} + \varphi\mathbf{p}^{(k)})$ . Si bien la resolución exacta de tal problema permite extraer el máximo beneficio de la dirección elegida, puede ser costosa de computar. Es por ello que habitualmente se recurren a métodos inexactos (Nocedal y Wright, 2006). En otros casos, el parámetro  $\varphi$  es constante durante todo el proceso iterativo. Tal es el caso del método de Landweber, en el que se adopta un valor fijo  $\varphi$  dentro del intervalo  $0 < \varphi < 1/\|\mathbf{A}\|^2$  (Vogel, 2002).

Una propiedad destacable de los métodos iterativos queda de manifiesto al graficar la norma

del error de la solución respecto al contador de iteraciones  $k$ . Se encuentra que el número de iteraciones adopta el papel del parámetro de regularización. Valores muy pequeños de  $k$  dan lugar a soluciones muy suavizadas, mientras que valores de  $k$  muy grandes dan lugar a reconstrucciones altamente oscilatorias.

El desarrollo de métodos iterativos se produjo ante la necesidad de encontrar alternativas cuando la matriz  $\mathbf{A}$  se torna excesivamente grande, haciendo prohibitiva la aplicación de métodos tradicionales basados en la descomposición SVD (Aster et al., 2018).

Entre los métodos más ampliamente desarrollados y estudiados (Aster et al., 2018; Ozisik, 2000; Mueller y Siltanen, 2012; Vogel, 2002; Colaço et al., 2006) se encuentran los métodos de Landweber, gradiente conjugado, descenso más pronunciado, Newton-Raphson, cuasi-Newton, entre otros, los cuales se caracterizan por la selección de la dirección de descenso adoptada.

#### 2.6.4. Regularización por pasos de tiempo futuros

Esta estrategia fue propuesta por Beck et al. (1985), y los fundamentos matemáticos dados por Lamm (1995). Si bien esta técnica emerge del análisis discreto de problemas térmicos inversos, puede aplicarse a otros casos fuera del contexto de problemas de transferencia de calor. En el próximo capítulo desarrollaremos en detalle esta técnica.

## 2.7. Problemas inversos no lineales

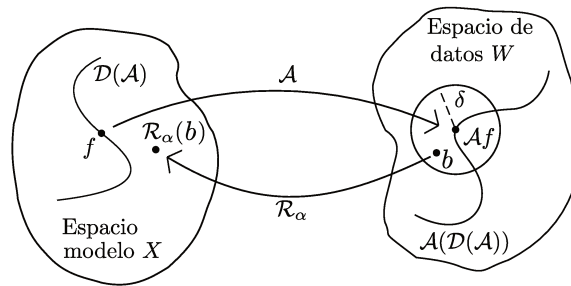
Los problemas inversos no lineales presentan un grado de dificultad muy superior en comparación con los lineales. Las técnicas desarrolladas para estos últimos relacionadas al estudio del cumplimiento de las condiciones de Hadamard (1902) no son suficientes, o ni siquiera aplicables, a los casos no lineales. El estudio de las técnicas matemáticas específicas para llevar a cabo dicho análisis se encuentra fuera del alcance de esta Tesis, por lo cual sólo se mencionarán los aspectos más relevantes de manera cualitativa. Por ejemplo, una estrategia posible consiste en asumir una linealización local de un problema no lineal en las inmediaciones de un entorno elegido (cuya elección implica en sí mismo un problema complementario), y luego aplicar las técnicas ya conocidas para el caso lineal en dicho entorno. En algunos casos, esta aproximación dará lugar a resultados útiles (Mueller y Siltanen, 2012), aunque en presencia de problemas fuertemente no lineales, dicho enfoque no será suficiente.

En concordancia con los términos empleados en la definición del modelo lineal, el modelo no lineal puede escribirse similarmente como

$$b = \mathcal{A}(f) + \varepsilon,$$

donde  $\mathcal{A} : \mathcal{D}(\mathcal{A}) \subset X \rightarrow W$  representa el mapeo no lineal directo, el cual puede estar también relacionado a una ecuación en derivadas parciales o a un operador integral. En este caso, el énfasis en la no linealidad se expresa con la cantidad  $f$  entre paréntesis, a diferencia de la ecuación (2.6). Conociendo de antemano el valor  $\delta > 0$  con el cual  $\|\varepsilon\|_Y \leq \delta$ , el problema inverso no lineal puede expresarse como: **“Dada una medición afectada por ruido de la forma  $b = \mathcal{A}(f) + \varepsilon$  y  $\delta > 0$ , con  $\|\varepsilon\| \leq \delta$ , extraer alguna información de  $f$ ”**.

Siendo que el mapeo directo no admite una inversa cuando las mediciones son perturbadas con ruido, se necesita recurrir a una estrategia de regularización consistente en la construcción de una familia  $\mathcal{R}_\alpha$  de mapeos continuos que vincule el espacio de datos  $W$  con el espacio modelo  $X$  de tal manera que  $f$  pueda ser reconstruida aproximadamente a partir de mediciones  $b$  afectadas por ruido. Al igual que en el caso lineal, esta estrategia debe, a su vez, estar acompañada de una regla de selección admisible del parámetro de regularización  $\alpha$ . En general, para niveles de ruido  $\delta$  pequeños la aproximación  $\mathcal{R}_\alpha(b)$  será más cercana a  $f$ . La figura 2.6 muestra una representación esquemática del mapeo directo y de la estrategia de regularización en el contexto no lineal.



**Figura 2.6:** Esquema conceptual de la regularización de problemas inversos no lineales.

En el caso de los problemas térmicos, la no linealidad del problema inverso puede ser identificada mediante el análisis de los coeficientes de sensibilidad tal como fuese explicado en la sección 2.4.3. La particularidad es que la no linealidad del problema inverso no necesariamente está relacionada a la no linealidad del problema térmico. La estimación inversa de coeficientes de transferencia térmica asociados a condiciones de borde mixtas en problemas de conducción de calor es un ejemplo de la situación mencionada (Beck et al., 1985). En el capítulo próximo se expondrán los métodos de resolución más habitualmente empleados para tratar tanto problemas lineales como no lineales.

## 2.8. Sumario

En este capítulo se presentaron los principales aspectos teóricos de los problemas inversos en general, incluyendo la formulación matemática de los problemas directo e inverso, y el concepto

de regularización. A su vez, se mostraron las particularidades del problema térmico inverso de conducción de calor de estimación de flujos de calor superficiales a partir de mediciones en un punto interior del dominio, estudiando las dificultades en la búsqueda de una solución estable. Luego, recurrimos a aproximaciones numéricas que permitieron brindar más detalles de los problemas térmicos. A su vez, se hizo referencia en diferentes oportunidades a la publicación de [Tourn et al. \(2021b\)](#) reproducida en el anexo B. Allí se propuso el empleo de la estrategia de regularización de variación total en un IHCP, la cual constituye uno de los principales aportes científicos derivados de esta Tesis. Se demostró la efectividad de dicha técnica (inexplorada hasta el momento en el ámbito de problemas térmicos inversos) para reconstruir flujos de calor superficiales de forma arbitraria, pero particularmente aquellos que presentan discontinuidades de salto finito, los cuales representan un problema de referencia típico en el contexto descrito.



## Capítulo 3

# Implementación de un método inverso secuencial

### 3.1. Introducción

Los métodos de resolución de problemas térmicos inversos son clasificados habitualmente en base al dominio temporal empleado. Dicha clasificación define métodos *de dominio completo* y *secuenciales* (Beck et al., 1985). Para explicar la distinción entre una y otra categoría, consideremos el problema PII presentado en el capítulo anterior. El objetivo es la determinación del flujo de calor (incógnita) en la superficie externa del cuerpo partiendo de una historia discreta de temperaturas  $Y$  conocida en el punto interno  $s$ . La característica distintiva de los métodos de dominio completo es la obtención simultánea de todas las incógnitas en cada instante del dominio temporal discretizado conociendo todas las mediciones de temperaturas  $Y_m$  *a priori*. En términos prácticos, esta particularidad implica que la estimación de las incógnitas puede realizarse una vez que ha concluido el experimento en el cual se registran los datos de temperatura  $Y_m$ .

Los métodos secuenciales se diferencian de los métodos de dominio completo en la posibilidad de estimar las incógnitas al mismo (o casi al mismo) tiempo en que las temperaturas están siendo registradas en el experimento considerado. Esto es posible porque, en un instante de tiempo en particular, la formulación de estos métodos tiene en cuenta no sólo las temperaturas y las estimaciones de flujo hasta dicho instante inclusive, sino que también tiene en cuenta una pequeña cantidad de mediciones futuras de temperatura asociadas a instantes de tiempo futuros. En cada paso de tiempo del algoritmo de resolución, sólo se toma en cuenta un dominio temporal reducido en lugar del dominio temporal completo. Esta característica posiciona a los métodos secuenciales como estrategias de cálculo adecuadas cuando se desea practicar alguna acción de control o monitoreo en las condiciones de transferencia de calor incidentes sobre el cuerpo.

Por su concepción, la metodología de estimación secuencial cuenta con el potencial para ser empleada como parte de una estrategia de control de un proceso industrial de transferencia de calor dado que permite la estimación en tiempo (cuasi-) real de las incógnitas del problema. En este sentido, el efecto que producen dichas incógnitas sobre el sistema en el que actúan en cada paso de tiempo indicaría el grado de ajuste entre las condiciones requeridas y las condiciones reales del sistema. Existen varios ejemplos disponibles en la literatura del empleo de estrategias “en línea” para el control de procesos industriales como enfriamiento y templado de aceros (Ali et al., 2010; Borean et al., 2011; Aamir et al., 2014), procesos de mecanizado (Huang et al., 2018; Norouzifard y Hamed, 2014), predicción de espesores de capas fundidas en hornos metalúrgicos (LeBreux et al., 2013), entre otros.

En este capítulo se mencionarán los aspectos más relevantes de la implementación de métodos inversos secuenciales. En particular, se presentarán los métodos de Beck et al. (1985) y basados en gradiente. Luego, se mostrará brevemente una implementación particular de un método perteneciente a la segunda categoría denominado “Método cuasi-Newton secuencial”, el cual da origen a uno de los aportes científicos más relevantes de esta Tesis (Tourn et al., 2021c). La reproducción completa de tal publicación, en la que se abordan los detalles de la implementación y los principales resultados de su aplicación en problemas térmicos inversos en una y dos dimensiones, puede hallarse en el anexo A.

### 3.2. Solución numérica del problema térmico

En esta Tesis se empleará una aproximación numérica del problema térmico transiente continuo por medio del método de elementos finitos (MEF). En esencia, el MEF (Lewis et al., 2004; Zienkiewicz et al., 2005; Chandrupatla et al., 2002) considera que la región del espacio en la que se busca la solución al problema físico comprende una gran cantidad de pequeñas sub-regiones (elementos) interconectadas, originando una aproximación de las ecuaciones en derivadas parciales que modelan el problema físico, las cuales son reducidas a un sistema de ecuaciones algebraicas que pueden o no ser lineales. Entonces, el proceso de discretización en elementos finitos reduce el problema continuo (de dimensión infinita) a uno con un número finito de incógnitas en puntos específicos del dominio denominados *nodos*.

Sea el problema de conducción de calor unidimensional transiente planteado en una placa infinitamente larga de espesor  $L$ , cuyas características principales se muestran en la figura 3.1. La configuración es similar a la del problema PD1, a excepción que la frontera izquierda de la placa, en lugar de estar expuesta a un flujo de calor  $q(t)$ , se encuentra expuesta a un medio cuya temperatura es  $T_\infty$ . Tal situación puede ser modelada mediante una condición de borde mixta



considerando un coeficiente de convección transiente  $h(t)$ . Nos referiremos a este como “problema PD2”, donde nuevamente la letra “D” indica que se trata de un problema directo. La formulación matemática está dada por el PVIB definido por la ecuación de gobierno (3.1a), las condiciones de borde (3.1b) y (3.1c) y la condición inicial (3.1d):

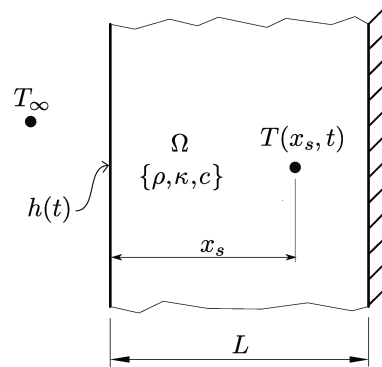
$$\rho c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right), \quad x \in (0, L), \quad t \in (t_0, t_f], \quad (3.1a)$$

$$\kappa \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = h(t)[T(0, t) - T_\infty], \quad x = 0, \quad t \in (t_0, t_f], \quad (3.1b)$$

$$\frac{\partial T(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, \quad t \in (t_0, t_f], \quad (3.1c)$$

$$T(x, t_0) = T_0, \quad x \in [0, L], \quad t = t_0. \quad (3.1d)$$

El problema inverso correspondiente a este caso, al cual nos referiremos como “problema PI2”, consiste en la estimación de la función  $h(t)$  (ahora desconocida) mediante una expresión  $\hat{h}(t)$  de tal manera que se cumpla la condición  $|T(x_s, t; \hat{h}(t)) - Y(t)| \approx \sigma$ , donde nuevamente hemos empleado la notación  $T(\dots; \hat{h}(t))$  para enfatizar la dependencia de la temperatura con la función estimada  $\hat{h}(t)$ .



**Figura 3.1:** Configuración del problema PD2.

Consideremos la implementación del MEF para el problema directo PD2. Para ello, debemos proponer una discretización del dominio unidimensional  $\Omega$  en un conjunto de elementos finitos, la cual genera una serie de nodos  $N$ . Asumiendo que dicha división es equiespaciada, la longitud de cada elemento puede identificarse como  $\Delta x$ . Denominaremos como *mallado de elementos finitos*, o simplemente *mallado*, al conjunto de elementos generados y sus respectivos nodos. En el contexto del MEF, el campo de temperaturas en cualquier punto e instante de tiempo es aproximado como

$$T(x, t) = \mathbf{N}(x)^T \mathbf{T}(t),$$

donde  $\mathbf{N}(x)$  es el vector columna que contiene las funciones de forma asociadas a cada nodo de

la malla y  $\mathbf{T}(t)$  es el vector columna que almacena las temperaturas en cada nodo de la malla en el instante de tiempo  $t$ . El proceso de interpolación de elementos finitos junto al procedimiento Galerkin, el cual implica ponderar utilizando las funciones de forma en sí mismas, lleva a la forma débil semi-discreta del problema PD1

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{Q}, \quad (3.2)$$

donde el punto encima de  $\mathbf{T}$  indica derivada temporal,  $\mathbf{C}$  y  $\mathbf{K}$  son las matrices de capacitancia y de conductividad respectivamente y  $\mathbf{Q}$  el vector de cargas nodales, dados por

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \int_0^L \rho c \mathbf{N} \mathbf{N}^T dx, \\ \mathbf{K} &= \underbrace{\int_0^L \kappa \nabla \mathbf{N} \nabla \mathbf{N}^T dx}_{\equiv \mathbf{K}_\kappa} + \underbrace{h(t) \mathbf{N}(0) \mathbf{N}(0)^T}_{\equiv \mathbf{K}_h}, \\ \mathbf{Q} &= h(t) T_\infty \mathbf{N}(0), \end{aligned}$$

donde  $\mathbf{K}_\kappa$  y  $\mathbf{K}_h$  son las contribuciones a la matriz de rigidez total  $\mathbf{K}$  debidas a la conductividad  $\kappa$  y al coeficiente de convección  $h(t)$ , respectivamente.

La obtención de una ecuación completamente discreta se consigue luego del proceso de discretización temporal. Usando la regla generalizada de punto medio en la expresión (3.2), se obtiene el sistema de ecuaciones algebraicas

$$\mathbf{C}_{m+\theta-1} \frac{\mathbf{T}_m - \mathbf{T}_{m-1}}{\Delta t} + \mathbf{K}_{m+\theta-1} [\theta \mathbf{T}_m + (1 - \theta) \mathbf{T}_{m-1}] = \mathbf{Q}_{m+\theta-1}, \quad (3.4)$$

donde el subíndice  $m + \theta - 1$  denota evaluación al instante  $t_{m+\theta-1} = \theta t_m + (1 - \theta) t_{m-1}$ ,  $0 \leq \theta \leq 1$ ,  $\Delta t = t_m - t_{m-1}$  y  $\theta$  es un parámetro que no sólo controla la estabilidad del esquema de integración, sino también su precisión (Zienkiewicz et al., 2005).

Los esquemas más empleados son: i) Euler hacia adelante ( $\theta = 0$ , completamente explícito y con precisión de primer orden); ii) Euler hacia atrás ( $\theta = 1$  completamente implícito, con precisión de primer orden); y iii) Crank-Nicolson ( $\theta = 1/2$ , implícito, con precisión de segundo orden). Los esquemas implícitos ( $\theta \geq 1/2$ ) son incondicionalmente estables. En lo que sigue adoptaremos el método Euler hacia atrás, con lo que la ecuación (3.4) toma la forma:

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}_m) \equiv \mathbf{C}(\mathbf{T}_m) \frac{\mathbf{T}_m - \mathbf{T}_{m-1}}{\Delta t} + \mathbf{K}(\mathbf{T}_m) \mathbf{T}_m - \mathbf{Q}_m = \mathbf{0}, \quad (3.5)$$

El método de resolución del sistema de ecuaciones (3.5) dependerá, en el caso considerado,

de las propiedades termo-físicas  $\rho c$  y  $\kappa$  del cuerpo. Si estas son independientes de la temperatura, las matrices  $\mathbf{C}$  y  $\mathbf{K}$  son constantes y el sistema de ecuaciones (3.5) resulta lineal. Su solución es

$$\mathbf{T}_m = \left( \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} + \mathbf{K} \right)^{-1} \left( \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} \mathbf{T}_{m-1} + \mathbf{Q}_m \right).$$

Ahora, si las propiedades  $\rho c$  y  $\kappa$  son termo-dependientes, el problema térmico es no lineal, y resulta necesario recurrir a esquemas iterativos para calcular las temperaturas a cada paso de tiempo. Conocida la temperatura  $\mathbf{T}_{m-1}$  en el instante  $t_{m-1}$ , se adopta  $\mathbf{T}_m^{(k)} = \mathbf{T}_{m-1}$  como estimación de la temperatura incógnita  $\mathbf{T}_m$  al instante  $t_m = t_{m-1} + \Delta t$  en la iteración inicial  $k = 0$ . Usando el esquema iterativo de Newton-Raphson, el residuo  $\mathbf{R}$  para la nueva estimación  $\mathbf{T}^{(k+1)}$  es aproximado linealmente

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}_m^{(k+1)}) = \mathbf{R}(\mathbf{T}_m^{(k)}) + \left. \frac{\partial \mathbf{R}}{\partial \mathbf{T}} \right|_{\mathbf{T}_m^{(k)}} \left( \mathbf{T}_m^{(k+1)} - \mathbf{T}_m^{(k)} \right), \quad (3.6)$$

donde  $\partial \mathbf{R} / \partial \mathbf{T}$  se conoce como matriz tangente. La condición  $\mathbf{R}(\mathbf{T}_m^{(k+1)}) = \mathbf{0}$  define una ecuación lineal con incógnita  $\mathbf{T}_m^{(k+1)}$ . El proceso iterativo finaliza cuando  $\|\mathbf{R}(\mathbf{T}_m^{(k+1)})\|$  es menor que una tolerancia preestablecida.

En cualquiera de los dos casos mencionados, lineal o no lineal, tanto el vector de cargas nodales  $\mathbf{Q}$  como la componente  $\mathbf{K}_h$  de la matriz de rigidez deben modificarse para contemplar la variación temporal del coeficiente de convección. En consecuencia, resulta necesario adoptar una aproximación discreta adecuada de la función  $h(t)$ . De manera similar a la discretización realizada sobre el flujo de calor  $q(t)$  (ver la figura 2.3) que dio origen al vector  $\mathbf{q}$ , las componentes discretas del coeficiente de convección se almacenan en el vector  $\mathbf{h} = [h_1, h_2, \dots, h_m, \dots, h_M]^T$ , con lo cual

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_m &\equiv h(t_m) \mathbf{N}(0) = h_m \mathbf{N}(0), \\ (\mathbf{K}_h)_m &\equiv h(t_m) \mathbf{N}(0) \mathbf{N}(0)^T = h_m \mathbf{N}(0) \mathbf{N}(0)^T. \end{aligned}$$

### 3.3. Método de Beck

Beck et al. (1985) desarrollaron el *método secuencial de especificación de función* (SFSM, por sus siglas en inglés), el cual expondremos a continuación. A diferencia del problema PD1, los coeficientes de sensibilidad del problema PD2 son dependientes de las incógnitas  $h$ , con lo cual el problema inverso según el SFSM es no lineal, aún cuando las propiedades termo-físicas sean independientes de la temperatura. Una alternativa es calcular el coeficiente de convección de

manera indirecta mediante el empleo de la ley de enfriamiento de Newton (Lienhard, 2011)

$$h(t) = \frac{q(t)}{T_\infty - T(0, t)}, \quad (3.8)$$

en la cual se emplean tanto el flujo de calor como la temperatura en la superficie expuesta. Por lo tanto, el SFSM puede ser aplicado para estimar el flujo discreto  $\mathbf{q}$  en lugar del coeficiente de convección discreto  $\mathbf{h}$ . A continuación expondremos el SFSM para la estimación inversa del flujo de calor superficial  $\mathbf{q}$ , y luego se dará una expresión discreta para el cálculo indirecto de  $\mathbf{h}$ .

Previo al desarrollo del método, re-definiremos la expresión (2.21) de manera de contemplar  $r$  instantes de tiempo más allá de  $t_{M-1}$ , hasta  $t_{M+r-1}$ . Surgen, entonces, los vectores  $\Theta = [\Theta_1, \Theta_2, \dots, \Theta_{M-1}, \Theta_M, \dots, \Theta_{M+r-1}]^T$  y  $\mathbf{q} = [q_1, q_2, \dots, q_{M-1}, q_M, \dots, q_{M+r-1}]^T$  y la matriz  $\mathbf{X}$  como

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \Delta\phi_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \Delta\phi_1 & \Delta\phi_0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \Delta\phi_2 & \Delta\phi_1 & \Delta\phi_0 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \Delta\phi_{M-1} & \Delta\phi_{M-2} & \Delta\phi_{M-3} & \cdots & \Delta\phi_0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \Delta\phi_M & \Delta\phi_{M-1} & \Delta\phi_{M-2} & \cdots & \Delta\phi_1 & \Delta\phi_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \Delta\phi_{M+r-2} & \Delta\phi_{M+r-3} & \Delta\phi_{M+r-4} & \cdots & \Delta\phi_{r-1} & \Delta\phi_{r-2} & \cdots & \Delta\phi_0 \end{pmatrix}. \quad (3.9)$$

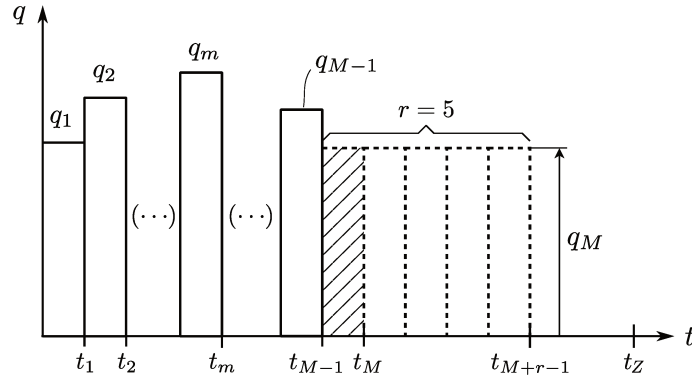
La hipótesis inicial del método es que el flujo de calor es conocido para  $t < t_{M-1}$ . A partir de aquí, el procedimiento correspondiente al problema lineal está compuesto por los siguientes pasos (Beck et al., 1985):

1. Definir un valor entero para el parámetro  $r \ll Z$  (donde  $Z$  es el número total de instantes de tiempo definidos por la discretización temporal elegida para el dominio  $t \in [t_0, t_f]$ ) y asumir una forma funcional  $q(t)$  para el intervalo temporal  $[t_M, t_{M+r-1}]$ ;
2. Para los instantes de tiempo definidos en el paso previo, definir una función de suma de los cuadrados de las diferencias entre las temperaturas medidas y calculadas;
3. Estimar las componentes del flujo de calor para la forma funcional elegida;
4. Retener solo la primera componente,  $\hat{q}_M$ ;
5. Calcular  $\hat{h}_M$ ;
6. Incrementar  $M$  en una unidad y repetir el procedimiento, hasta que  $M + r - 1 = Z$ .

La denominación de *método secuencial de especificación de función* que recibe el procedimiento planteado radica en la necesidad de asumir la forma funcional que debe adoptar el flujo  $q(t)$  en el intervalo temporal  $[t_M, t_{M+r-1}]$ . La más habitualmente empleada por su sencillez y por su capacidad de proporcionar resultados suficientemente precisos es la forma funcional constante

$$q_{M+1} = q_{M+2} = \dots = q_{M+r-1} = q_M,$$

la cual implica que  $r$  componentes “futuras” del flujo de calor son asumidas iguales de forma temporaria (ver figura 3.2, con  $r = 5$  como ejemplo).



**Figura 3.2:** Forma funcional  $q(t) \equiv q_M$  asumida constante en los  $r = 5$  pasos definidos delante de  $t_{M-1}$ , para determinar la componente del flujo correspondiente al instante  $t_M$  (identificada mediante un tramado oblicuo), conociendo las componentes  $q_1, q_2, \dots, q_{M-1}$ .

Luego, el ítem 2 implica hallar expresiones correspondientes para las temperaturas  $\Theta_M, \Theta_{M+1}, \dots, \Theta_{M+r-1}$ . Operando algebraicamente con las expresiones re-definidas de  $\mathbf{T}$ ,  $\mathbf{q}$  y  $\mathbf{X}$ , se demuestra que:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Theta_M = \left( \sum_{i=1}^{M-1} \hat{q}_i \Delta \phi_{M-i} + T_0 \right) + \phi_1 q_M \equiv \hat{\Theta}_M|_{q_M=0} + \phi_1 q_M \\ \Theta_{M+1} = \left( \sum_{i=1}^{M-1} \hat{q}_i \Delta \phi_{M-i+1} + T_0 \right) + \phi_2 q_M \equiv \hat{\Theta}_M|_{q_M=q_{M+1}=0} + \phi_2 q_M \\ \vdots \\ \Theta_{M+r-1} = \left( \sum_{i=1}^{M-1} \hat{q}_i \Delta \phi_{M-i+r-1} + T_0 \right) + \phi_r q_M \equiv \hat{\Theta}_M|_{q_M=\dots=q_{M+r-1}=0} + \phi_r q_M, \end{array} \right.$$

en la que las cantidades  $\Delta \phi$  corresponden a las componentes de la matriz de sensibilidad (3.9). Con el fin de simplificar la notación, se definió  $\phi_j = \sum_{i=0}^{j-1} \Delta \phi_i$ . La notación empleada  $\hat{\Theta}_M|_{q_M=\dots=q_{M+i-1}=0}$  representa la temperatura calculada (en este caso, vía MEF) en el instante  $M+i-1$  asumiendo que las componentes del flujo entre los instantes  $M$  y  $M+i-1$  son todas nulas. De esta manera, la función de mínimos cuadrados, con las temperaturas medidas denotadas como  $Y_M, Y_{M+1}, \dots$ ,

$Y_{M+r-1}$ , viene dada por

$$S \equiv \sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - \Theta_{M+i-1})^2 = \sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - \hat{\Theta}_{M+i-1}|_{q=0} - \phi_i q_M)^2.$$

La minimización implica diferenciar la ecuación previa con respecto a  $q_M$ , igualar a cero la expresión resultante, y reemplazar  $q_M$  por su estimación de acuerdo al paso 1, dando origen a la ecuación

$$\hat{q}_M = \frac{\sum_{i=1}^r (Y_{M+i-1} - \hat{\Theta}_{M+i-1}|_{q_M=\dots=0} - \phi_i q_M)}{\sum_{i=1}^r \phi_i^2} \quad (3.10)$$

que corresponde al paso 3. Luego de retener sólo la primera componente de  $\hat{q}_M$  (paso 4), el cómputo de la cantidad  $\hat{h}_M$  correspondiente (teniendo en cuenta la expresión (3.8)) se realiza según

$$\hat{h}_M = \frac{\hat{q}_M}{T_\infty - 0.5[\hat{T}(0, t_M) + \hat{T}(0, t_{M-1})]}, \quad (3.11)$$

donde  $\hat{T}(0, t_j)$  representa la temperatura estimada en la superficie expuesta en el instante de tiempo  $j$ . La ecuaciones (3.10) y (3.11) proveen un algoritmo para ser empleado de manera secuencial incrementando  $M$  en una unidad en cada paso de tiempo (paso 5).

La característica principal del SFSM radica en su capacidad para reducir sustancialmente la sensibilidad de la estimación frente de errores en las mediciones  $Y_{M+1}, \dots, Y_{M+r-1}$  cuando se emplean varias temperaturas futuras, es decir  $r > 1$ . En el caso límite donde  $r \gg 1$ , las soluciones son amortiguadas en demasía. En el caso límite opuesto donde  $r = 1$ , la ecuación (3.10) coincide con el método de [Stolz Jr \(1960\)](#), el cual no proporciona resultados útiles debido a su extrema sensibilidad respecto a errores en las mediciones.

La capacidad para estabilizar la solución en función de la elección del parámetro  $r$  es interpretada como una regularización propia de este método ([Beck et al., 1985](#)), siendo [Lamm \(1995\)](#) quien realizara los aportes necesarios para demostrar matemáticamente dicha propiedad. A su vez, [Beck et al. \(1985\)](#) demostró que aumentar la función de mínimos cuadrados mediante el agregado de un término de regularización como en el caso de algoritmos de dominio temporal completo, no conduce a un mejoramiento de la solución en términos de estabilidad frente al ruido.

Como observación final, mencionamos que el desarrollo del SFSM para el cálculo directo de las componentes  $\hat{h}_M$  implica el empleo de una estrategia de linearización iterativa de Gauss-Newton ([Beck y Osman, 1989](#); [Osman y Beck, 1990](#)). Bajo este esquema, la expresión que permite

calcular iterativamente la componente del coeficiente  $\hat{h}_M$  de convección viene dada por

$$\hat{h}_M^{(k)} = \hat{h}_M^{(k-1)} + \frac{\sum_{i=1}^r (Y_{M-i+1} - \hat{T}_{M+i-1}^{(k-1)}) \Phi_{M+i-1}^{(k-1)}}{\sum_{i=1}^r (\Phi_{M+i-1}^{(k-1)})^2}, \quad (3.12)$$

donde  $(k)$  corresponde a la iteración actual,  $\Phi_{M+i-1}^{(k-1)}$  es el coeficiente de sensibilidad no lineal correspondiente a la iteración previa  $(k-1)$  y  $\hat{T}_{M+i-1}^{(k-1)}$  es la temperatura también en la iteración  $(k-1)$ . La expresión (3.12) se resuelve iterativamente hasta que los cambios en  $\hat{h}_M^{(k)}$  sean menores a una tolerancia preestablecida, tal como

$$\left| \frac{\hat{h}_M^{(k)} - \hat{h}_M^{(k-1)}}{\hat{h}_M^{(k)}} \right| < 10^{-5}.$$

En general, los resultados que provee el cómputo del coeficiente de convección bajo la expresión (3.12) son muy similares a los obtenidos mediante el cómputo indirecto (3.11) (Beck et al., 1985).

### 3.4. Método de gradiente conjugado secuencial

El método de gradiente conjugado, o CGM por sus siglas en inglés, es un método iterativo originalmente concebido por Hestenes et al. (1952) para resolver sistemas de ecuaciones lineales de la forma  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$  cuya matriz de coeficientes  $\mathbf{A}$  sea positivo-definida. En tal caso, una definición equivalente de dicho sistema es el planteo de la minimización

$$\min_{\mathbf{f}} \frac{1}{2} \mathbf{f}^T \mathbf{A} \mathbf{f} - \mathbf{b}^T \mathbf{f},$$

cuya resolución arroja el mismo resultado que la resolución del sistema  $\mathbf{A}\mathbf{f} = \mathbf{b}$ . De esta manera, el CGM resulta una estrategia válida tanto para resolver sistemas de ecuaciones lineales como una técnica de minimización de funciones cuadráticas convexas. Por otra parte, el método puede extenderse para considerar funcionales que no sean necesariamente cuadráticos, dando lugar al método no lineal propuesto por Fletcher y Reeves (1964), y que se desarrollará más adelante.

En su empleo para la resolución de problemas inversos, el CGM puede ser implementado tanto para abordar la resolución de problemas de dominio completo como problemas definidos secuencialmente.

En esencia (Ozisik, 2000; Shewchuk et al., 1994; Nocedal y Wright, 2006), en cada iteración del proceso se elige un paso de búsqueda adecuado a lo largo de una dirección de descenso con el

fin de hallar el mínimo de una función objetivo. Dicha dirección es obtenida como una combinación lineal de la dirección opuesta al gradiente en la iteración actual con la dirección de descenso de la iteración previa. La combinación lineal es tal que el ángulo resultante entre las direcciones mencionadas es menor a  $90^\circ$ , asegurando así la minimización de la función objetivo bajo ciertas hipótesis. La selección de un criterio de parada adecuado con el cual ejecutar una detención prematura del algoritmo es fundamental para obtener soluciones estables, otorgando así al CGM la característica de proveer una regularización iterativa “incorporada” intrínsecamente en su formulación (Alifanov, 1994; Engl et al., 1996; Ozisik, 2000). En otras palabras, el índice de iteración adopta el rol del parámetro de regularización  $\alpha$  y el criterio de parada corresponde a la regla de selección del parámetro de regularización (Engl et al., 1996).

Uno de los principales inconvenientes en la implementación del CGM en problemas de minimización de funciones generales (no necesariamente lineales) es el cálculo del gradiente de la función objetivo (Nocedal y Wright, 2006), o más precisamente, la matriz de sensibilidad del problema inverso (Ozisik, 2000). En general, no es posible obtener una expresión cerrada para computarla de manera directa, excepto en algunos problemas lineales particulares. De hecho, una de las técnicas empleadas para su cálculo aproximado en cada paso del proceso iterativo es mediante el método de diferencias finitas (Ozisik, 2000). La expresión correspondiente de los coeficientes de sensibilidad con respecto a  $q_j$ , empleando un esquema de diferencias finitas hacia adelante, es

$$X_{ij} = \frac{T(x_s, t_i; q_1, q_2, \dots, q_j + \epsilon q_j, \dots, q_M) - T_i(x_s, t_i; q_1, q_2, \dots, q_j, \dots, q_M)}{\epsilon q_j}, \quad (3.13)$$

donde  $\epsilon$  es un parámetro que indica la perturbación en la dirección  $\epsilon q_j$ . Típicamente, se emplea un valor  $\epsilon \approx 10^{-5}$  o  $\epsilon \approx 10^{-6}$ . Se puede advertir que el cálculo empleando la ecuación (3.13) implica el cómputo de  $M$  soluciones adicionales del problema directo. Por lo tanto, la obtención de la matriz de sensibilidad por este método es computacionalmente muy costosa.

Una formulación alternativa del CGM que evita el cómputo de la matriz de sensibilidad es aquella que recurre a la definición de los problemas auxiliares *adjunto* y de *sensibilidad* (Ozisik, 2000; Alifanov, 1994), los cuales permiten obtener el gradiente de la función objetivo y el paso de búsqueda. Esta metodología alternativa implica definir una serie de pasos básicos, a saber:

1. Problema directo
2. Problema inverso
3. Función objetivo
4. Problema de sensibilidad
5. Problema adjunto



6. Ecuación del gradiente
7. Proceso iterativo
8. Criterio de parada
9. Algoritmo computacional

### 3.4.1. CGM con problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad

Consideremos los problemas directo PD2 y su inverso asociado PI2 presentados en la sección 3.2. El objetivo es la estimación del coeficiente de convección transiente dado por la función  $h(t)$  a partir de una historia de temperaturas  $Y(t)$  conocida en la posición del sensor  $s$ . Se asume como hipótesis básica que la función desconocida  $h(t)$  pertenece al espacio de Hilbert de las funciones cuadrado-integrable  $L_2(t_0, t_f)$  en el dominio temporal  $t_0 \leq t \leq t_f$  (Ozisik, 2000; Alifanov, 1994). Habiendo definido los primeros dos pasos del método en la sección 3.2, procedemos con los pasos subsiguientes.

#### Función objetivo

Se emplea un funcional de mínimos cuadrados entre las temperaturas calculada  $T(x_s, t; h(t))$  y medida  $Y(t)$ , definido como

$$S(h(t)) = \int_{t_0}^{t_f} [T(x_s, t; h(t)) - Y(t)]^2 dt. \quad (3.14)$$

#### Problema de sensibilidad

Definimos la función de sensibilidad  $\Delta T(x, t)$ , que representa la solución del problema de sensibilidad, como la derivada de la temperatura  $T(x, t)$  en la dirección de la perturbación de la función desconocida.

En primer lugar, debemos escribir el problema directo PD2 reemplazando  $T(x, t)$  y  $h(t)$  por las cantidades perturbadas  $T(x, t) + \Delta T(x, t)$  y  $h(t) + \Delta h(t)$  en las ecuaciones (3.1), las que entonces resultan:

$$\rho c \frac{\partial [T(x, t) + \Delta T(x, t)]}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial [T(x, t) + \Delta T(x, t)]}{\partial x} \right), \quad x \in (0, L), t \in (t_0, t_f] \quad (3.15a)$$

$$\kappa \frac{\partial [T(0, t) + \Delta T(0, t)]}{\partial x} = [h(t) + \Delta h(t)][T(0, t) + \Delta T(0, t) - T_\infty], \quad x = 0, t \in (t_0, t_f] \quad (3.15b)$$

$$\frac{\partial [T(L, t) + \Delta T(L, t)]}{\partial x} = 0, \quad x = L, t \in (t_0, t_f] \quad (3.15c)$$

$$T(x, t_0) + \Delta T(x, t_0) = T_0, \quad x \in [0, L], t = t_0. \quad (3.15d)$$

Luego, definimos el problema de sensibilidad substrayendo las ecuaciones (3.1) del conjunto (3.15). El resultado es el PVIB dado por la ecuación de gobierno (3.16a), las condiciones de borde (3.16b) y (3.16c) y la condición inicial (3.16d):

$$\rho c \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial x} \right), \quad x \in (0, L), t \in (t_0, t_f] \quad (3.16a)$$

$$\kappa \frac{\partial \Delta T(0, t)}{\partial x} = h(t) \Delta T(0, t) + \Delta h(t) [T(0, t) + \Delta T(0, t) - T_\infty], \quad x = 0, t \in (t_0, t_f] \quad (3.16b)$$

$$\frac{\partial \Delta T(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, t \in (t_0, t_f] \quad (3.16c)$$

$$\Delta T(x, t_0) = 0, \quad x \in [0, L], t = t_0. \quad (3.16d)$$

### Problema adjunto

La derivación del problema adjunto es posible mediante el uso del multiplicador de Lagrange  $\lambda(x, t)$ , que permite escribir la función objetivo aumentada

$$\begin{aligned} \tilde{S}(h(t)) = & \int_{t_0}^{t_f} [T(x, t; h(t)) - Y(t)]^2 dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L \lambda(x, t) \left\{ \rho c \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) \right\} dx dt, \quad (3.17) \end{aligned}$$

en la que se advierte que el término entre llaves es cero en virtud de la ecuación (3.1a).

La variación  $\Delta \tilde{S}(h(t))$  del funcional  $\tilde{S}(h(t))$  también se define como la derivada del funcional  $\tilde{S}(h(t))$  en la dirección de la perturbación  $\Delta h(t)$ . Para hallar una expresión de dicha variación asumimos que  $T(x, t)$  es perturbado por  $\Delta T(x, t)$  cuando  $h(t)$  es perturbado por  $\Delta h(t)$ . En la expresión 3.17, reemplazamos  $T(x, t)$  y  $h(t)$  por sus cantidades perturbadas  $T(x, t) + \Delta T(x, t)$  y  $h(t) + \Delta h(t)$  respectivamente, y también  $\tilde{S}(h(t))$  por  $\tilde{S}(h(t)) + \Delta \tilde{S}(h(t))$

$$\begin{aligned} \tilde{S}(h(t)) + \Delta \tilde{S}(h(t)) = & \int_{t_0}^{t_f} \{ [T(x, t; h(t)) + \Delta T(x, t)] - Y(t) \}^2 dx dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L \lambda(x, t) \left\{ \rho c \frac{\partial}{\partial t} [T(x, t) + \Delta T(x, t)] - \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial}{\partial x} [T(x, t) + \Delta T(x, t)] \right) \right\} dx dt \quad (3.18) \end{aligned}$$

Sustrayendo la ecuación (3.17) de (3.18), a la vez que se descartan los términos de segundo orden en (3.18) (Ozisik, 2000), se llega a la expresión de la perturbación  $\Delta \tilde{S}(h(t))$  de la función

objetivo aumentada

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{S}(h(t)) = & \int_{t_0}^{t_f} 2[T(x, t; h(t)) - Y(t)]\Delta T(x, t) dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L \lambda(x, t) \left\{ \rho c \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( \kappa \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial x} \right) \right\} dx dt \end{aligned} \quad (3.19)$$

Utilizando integración por partes en la segunda integral, junto con las condición inicial (3.16d) y las condiciones de contorno (3.16b) y (3.16c) del problema de sensibilidad (3.16),  $\Delta\tilde{S}(h(t))$  puede ser expresado como

$$\begin{aligned} \Delta\tilde{S}(h(t)) = & \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L \left\{ 2[T(x, t; h(t)) - Y(t)]\delta(x - x_s) - \rho c \frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} - \dots \right. \\ & \dots - \left. \kappa \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} \right\} \Delta T(x, t) dx dt + \int_{t_0}^{t_f} \lambda(0, t) \Delta h(t) [T(0, t) + \Delta T(0, t) - T_\infty] dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \lambda(0, t) h(t) \Delta T(0, t) dt + \int_0^L \rho c \lambda(x, t_f) \Delta T(x, t_f) dx + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \lambda(L, t)}{\partial x} \kappa \frac{\partial \Delta T(L, t)}{\partial x} dt - \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \lambda(0, t)}{\partial x} \kappa \frac{\partial \Delta T(0, t)}{\partial x} dt. \end{aligned} \quad (3.20)$$

La anterior es la formulación débil del problema adjunto, cuya correspondiente formulación fuerte viene dada por el siguiente PVIb:

$$\rho c \frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} + \kappa \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} = 2[T(x, t; h(t)) - Y(t)]\delta(x - x_s), \quad x \in (0, L), t \in [t_0, t_f] \quad (3.21a)$$

$$\kappa \frac{\partial \lambda(0, t)}{\partial x} = \lambda(0, t) h(t), \quad x = 0, t \in [t_0, t_f] \quad (3.21b)$$

$$\frac{\partial \lambda(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, t \in [t_0, t_f] \quad (3.21c)$$

$$\lambda(x, t_f) = 0, \quad x \in [0, L], t = t_f. \quad (3.21d)$$

Al comparar los conjuntos de ecuaciones correspondientes, notamos que los problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad son matemáticamente equivalentes al problema directo PD2. Debido a este hecho, la solución del problema auxiliar puede obtenerse utilizando la misma formulación de elementos finitos que para el problema directo. La única diferencia es que la ecuación (3.21d) del problema adjunto es una condición final en vez de una condición inicial. Por lo tanto, el problema (3.21) debe resolverse hacia atrás en el tiempo, es decir, comenzando desde  $t_f$  hasta alcanzar  $t_0$ . El algoritmo para la determinación de  $\lambda$  fue introducido por Álvarez Hostos et al. (2019) para el diseño de un dispositivo de manipulación de flujo de calor en régimen transiente, y particularizado luego por Tourn et al. (2021c) para el caso de un IHCP. Ambas publicaciones son

reproducidas en los anexos D y A, respectivamente.

### La ecuación del gradiente

La expresión para el gradiente del funcional aumentado  $\tilde{S}$  es obtenida luego de eliminar los términos que contienen  $\Delta T(x, t)$  en la ecuación (3.20), conduciendo a

$$\Delta \tilde{S}(h(t)) = \int_{t_0}^{t_f} \lambda(0, t) [T(0, t) - T_\infty] \Delta h(t) dt$$

Invocando la hipótesis que la función desconocida  $h(t)$  pertenece al espacio de funciones cuadrado-integrables en el dominio  $t_0 \leq t \leq t_f$ , la ecuación previa puede escribirse como

$$\Delta \tilde{S}(h(t)) = \int_{t_0}^{t_f} \nabla \tilde{S}(h(t)) \Delta h(t) dt.$$

Comparando las dos últimas expresiones, obtenemos la ecuación que permite computar el gradiente del funcional  $\tilde{S}(h(t))$  como

$$\nabla \tilde{S}(h(t)) = \lambda(0, t) [T(0, t) - T_\infty]. \quad (3.22)$$

### El proceso iterativo

La estimación de la función desconocida  $h(t)$  es realizada por medio de la minimización del funcional  $S(h(t))$ . Esto es llevado a cabo con un proceso iterativo mediante la selección adecuada de la dirección de descenso  $d^{(k)}(t)$  y del paso de búsqueda  $\beta^{(k)}$ , para avanzar de la iteración  $k$  hacia la  $k + 1$ :

$$h^{(k+1)}(t) = h^{(k)}(t) + \beta^{(k)} d^{(k)}(t), \quad (3.23)$$

donde  $d^{(k)}(t)$  viene dado por

$$d^{(k)}(t) = -\nabla S(h^{(k)}(t)) + \gamma^{(k)} d^{(k-1)}(t). \quad (3.24)$$

El cómputo del coeficiente de conjugación  $\gamma^{(k)}$  puede realizarse utilizando las expresiones de

Polak-Ribiere (PR) o la de Fletcher-Reeves (FR), dadas respectivamente por

$$\gamma^{(k)} \equiv \gamma_{\text{PR}}^{(k)} = \frac{\int_{t_0}^{t_f} \nabla S(h^{(k)}(t)) \{ \nabla S(h^{(k)}(t)) - \nabla S(h^{(k-1)}(t)) \} dt}{\int_{t_0}^{t_f} \{ \nabla S(h^{(k-1)}(t)) \}^2 dt}, \quad y \quad (3.25a)$$

$$\gamma^{(k)} \equiv \gamma_{\text{FR}}^{(k)} = \frac{\int_{t_0}^{t_f} \{ \nabla S(h^{(k)}(t)) \}^2 dt}{\int_{t_0}^{t_f} \{ \nabla S(h^{(k-1)}(t)) \}^2 dt}, \quad (3.25b)$$

las cuales son válidas para  $k = 1, 2, \dots$ . Cuando  $k = 0$  se adopta  $\gamma^{(k)} = 0$ . Entonces, el proceso inicia con  $d^{(0)}(t) = -\nabla S[h^{(0)}(t)]$ .

A su vez, el paso de búsqueda en cada iteración es obtenido por medio de la minimización del funcional  $S(h^{(k+1)}(t))$  con respecto a  $\beta^{(k)}$ , haciendo

$$\hat{\beta}^{(k)} = \arg \min_{\beta^{(k)}} S(h^{(k+1)}(t)) = \arg \min_{\beta^{(k)}} \int_{t_0}^{t_f} [T(x_s, t; h^{(k)}(t) + \beta^{(k)} d^{(k)}(t)) - Y(t)]^2 dt, \quad (3.26)$$

en la que reemplazamos  $h^{(k+1)}(t)$  en la expresión de  $T(x_s, t; h^{(k+1)}(t))$  por el lado derecho de la ecuación (3.23). Entonces, mediante una expansión en serie de Taylor de primer orden de  $T(x_s, t; h^{(k+1)}(t))$ , la ecuación (3.26) toma la forma

$$\hat{\beta}^{(k)} = \arg \min_{\beta^{(k)}} \int_{t_0}^{t_f} [T(x_s, t; h^{(k)}(t)) + \beta^{(k)} \Delta T(x_s, t; d^{(k)}(t)) - Y(t)]^2 dt, \quad (3.27)$$

donde  $\Delta T(x_s, t; d^{(k)}(t))$  es la solución del problema de sensibilidad dado por las ecuaciones (3.16), obtenida haciendo  $\Delta h^{(k)}(t) = d^{(k)}(t)$ . Para minimizar la expresión (3.27), la diferenciamos con respecto a  $\beta^{(k)}$  e igualamos la expresión resultante a cero. Luego de operar algebraicamente, obtenemos la expresión que permite calcular el paso de búsqueda:

$$\beta^{(k)} = \frac{\int_{t_0}^{t_f} [T(x_s, t; h^{(k)}(t)) - Y(t)] \Delta T(x_s, t; d^{(k)}(t)) dt}{\int_{t_0}^{t_f} [\Delta T(x_s, t; d^{(k)}(t))]^2 dt}. \quad (3.28)$$

### Criterio de parada

El proceso iterativo dado por (3.23), junto al paso de búsqueda dado por (3.28), no provee al método de gradiente conjugado la estabilización necesaria de la función objetivo (3.14) para que el problema inverso se encuentre bien colocado. Sin embargo, el método de gradiente conjugado puede adquirir tal característica si se utiliza el principio de discrepancia (Alifanov, 1994; Ozisik,

2000) para detener el proceso iterativo. En tal escenario, el criterio de parada viene dado por

$$S(h(t)) < \epsilon, \quad (3.29)$$

donde  $\epsilon$  es un nivel de tolerancia elegido de tal manera de asegurar la obtención de soluciones suaves a partir de datos de entrada afectados por ruido. La solución es suficientemente precisa si se cumple la condición ya enunciada  $|T(x_s, t; h(t)) - Y(t)| \approx \sigma$ . Entonces, se obtiene el nivel de tolerancia  $\epsilon$  de la ecuación (3.14), como

$$\epsilon = \sigma^2(t_f - t_0),$$

siendo  $(t_f - t_0)$  el tiempo total del análisis transiente.

### El algoritmo computacional

El algoritmo de resolución implica proponer una semilla  $h^0(t)$  para la función transiente del coeficiente de convección. Partiendo de  $k = 0$ , los pasos son:

1. Resolver el problema directo (3.1) y computar el campo de temperaturas basado en  $h^{(k)}(t)$ , es decir  $T(x, t; h^{(k)}(t))$ .
2. Chequear el criterio de parada (3.29). Si se cumple, detener el proceso. En caso contrario, continuar al paso siguiente.
3. Conociendo  $T(x_s, t; h^{(k)}(t))$  y la temperatura medida  $Y(t)$ , resolver el problema adjunto (3.21) y computar  $\lambda(0, t)$ .
4. Conociendo  $\lambda(0, t)$ , computar el gradiente  $\nabla S(h^{(k)}(t))$  por medio de la ecuación (3.22).
5. Conociendo  $\nabla S(h^{(k)}(t))$ , computar  $\gamma^{(k)}$  utilizando cualquiera de las expresiones (3.25) y la dirección de descenso con la ecuación (3.24).
6. Hacer  $\Delta h^{(k)}(t) = d^{(k)}(t)$  y resolver el problema de sensibilidad (3.16) para obtener  $\Delta T(x_s, t; d^{(k)}(t))$ .
7. Conociendo  $\Delta T(x_s, t; d^{(k)}(t))$ , computar el paso de búsqueda  $\beta_k$  con la expresión (3.28).
8. Conociendo  $\beta^{(k)}$  y  $d^{(k)}(t)$ , computar una nueva estimación  $h^{(k+1)}(t)$  con la ecuación (3.23) y retornar al paso 1.

#### 3.4.2. Versión secuencial

El método hasta aquí expuesto permite el cómputo de la función  $h(t)$  según la estrategia de dominio temporal completo. Sin embargo, existe una versión secuencial denominada *método de gradiente conjugado secuencial*, o SCGM por sus siglas en inglés, que permite la determinación

en tiempo cuasi-real de las incógnitas a medida que se va disponiendo de datos de temperatura (Reinhardt y Hào, 1996; Dowding y Beck, 1999; Kim et al., 2002).

Esencialmente, el SCGM comparte con el CGM todas sus características y su estrategia de estimación mediante el uso de los problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad. La principal diferencia es que la estimación de  $h(t)$  ya no se realiza teniendo en cuenta el dominio temporal completo  $t \in [t_0, t_f]$ , sino que se recurre a la definición secuencial de un dominio temporal reducido  $t \in [t_M, t_{M+r-1}]$ , el cual implica la selección de un parámetro entero  $r > 0$ . Dicho parámetro indica la cantidad de pasos de tiempo futuros considerados en el algoritmo discreto, y cumple el mismo rol que su homónimo definido para el método de Beck et al. (1985), ver sección 3.3. El empleo del SCGM en el contexto de problemas térmicos inversos fue discutido y aceptado por varios autores (Beck y Osman, 1989; Kim et al., 2002, 2003b; Tourn et al., 2021c; Xiong et al., 2020).

### 3.5. Método cuasi-Newton secuencial

Uno de los aportes más significativos de esta Tesis es la proposición del método cuasi-Newton secuencial (Tourn et al., 2021c), al cual nos referiremos como SQNM por sus siglas en inglés. El SQNM es una estrategia de cómputo secuencial basada en el SCGM con problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad, especialmente concebida para tratar problemas de estimación de flujos de calor superficiales y de coeficientes de convección en problemas térmicos transientes uni- y bidimensionales, especialmente no lineales. A su vez, permite la incorporación de múltiples sensores y el cómputo de varias incógnitas correspondientes a distintas porciones de frontera externa del cuerpo considerado.

La principal diferencia con el SCGM es la metodología de actualización de la dirección de descenso. Mientras que en el SCGM se empleó la expresión (3.24), en el SQNM se recurre a un proceso iterativo cuasi-Newton sugerido independientemente por Broyden (1969), Fletcher (1970), Goldfarb (1970) y Shanno (1970), comúnmente conocido como BFGS. Bajo este esquema, la expresión que permite computar la aproximación discreta de la dirección de descenso es

$$\mathbf{d}^{(k+1)} = -(\mathbf{B}^{(k+1)})^{-1} \nabla S^{(k+1)}, \quad (3.30)$$

donde la matriz  $\mathbf{B}^{(k+1)}$ , que aproxima el Hessiano  $\nabla^2 S^{(k+1)}$ , es actualizada en cada iteración utilizando una fórmula de rango bajo, puntualmente de rango doble<sup>1</sup>. Tal matriz es elegida para

<sup>1</sup>La fórmula de actualización contiene la suma de dos matrices de rango 1. Dados dos vectores columna  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^n$  y  $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^m$ , la matriz  $\mathbf{A} = \mathbf{u}\mathbf{v}^T \in \mathbb{R}^{n \times m}$  posee rango 1.

satisfacer la condición secante (Molavi et al., 2013; Nocedal y Wright, 2006)

$$\mathbf{B}^{(k+1)} \mathbf{s}^{(k)} = \mathbf{y}^{(k)},$$

siendo  $\mathbf{y}^{(k)} = \nabla S^{(k)} - \nabla S^{(k-1)}$  y  $\mathbf{s}^{(k)} = \beta^{(k)} \mathbf{d}^{(k)}$ . La formulación BFGS define la matriz aproximada  $\mathbf{H}^{(k+1)} = (\mathbf{B}^{(k+1)})^{-1}$  (Molavi et al., 2013) como

$$\mathbf{H}^{(k+1)} = \left( \mathbf{I} - \frac{\mathbf{s}^{(k)} [\mathbf{y}^{(k)}]^\top}{\Psi^{(k)}} \right) \mathbf{H}^{(k)} \left( \mathbf{I} - \frac{\mathbf{y}^{(k)} [\mathbf{s}^{(k)}]^\top}{\Psi^{(k)}} \right) + \frac{\mathbf{s}^{(k)} [\mathbf{s}^{(k)}]^\top}{\Psi^{(k)}}, \quad (3.31)$$

donde  $\Psi^{(k)} = [\mathbf{y}^{(k)}]^\top \mathbf{s}^{(k)}$  y  $\mathbf{I}$  es la matriz identidad. La tasa de convergencia de la estrategia cuasi-Newton bajo el esquema BFGS es menor que segundo orden (Nocedal y Wright, 2006).

En su versión discreta, la implementación secuencial de la metodología presentada basada en gradiente con problemas auxiliares adjunto y de sensibilidad descrita en las dos secciones precedentes implica la definición del parámetro  $r$ . Se asume que se conocen los valores discretos de la función  $h(t)$  hasta el instante  $t_{M-1}$ , los cuales se almacenan en el vector  $\mathbf{h} = [h_1, h_2, \dots, h_{M-1}]^\top$ . Luego, el proceso secuencial está compuesto por los siguientes pasos (Tourn et al., 2021c):

1. Seleccionar el número de pasos de tiempo futuros  $r \ll Z$ .
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 definido como  $\Upsilon_r = [Y_M, Y_{M+1}, \dots, Y_{M+r-1}]^\top$ .
3. Hacer  $k = 0$  y proponer una semilla para el vector de coeficientes de convección discretos desconocidos, el cual puede escribirse como  $\mathbf{h}_r^{(k)} = [h_M^{(k)}, h_{M+1}^{(k)}, \dots, h_{M+r-1}^{(k)}]^\top$ .
4. Computar numéricamente la temperatura  $\Theta_r^{(k)} = [\Theta_M^{(k)}, \Theta_{M+1}^{(k)}, \dots, \Theta_{M+r-1}^{(k)}]^\top$  en la posición del sensor  $s$  mediante el MEF definido en la sección 3.2.
5. Computar numéricamente la función objetivo  $S(\mathbf{h}_r^{(k)})$  con la ecuación (3.14) utilizando  $\Theta_r^{(k)}$  definido en el paso 4 y  $\Upsilon_r^{(k)}$  del paso 2 y chequear el criterio de parada (3.29). Si se cumple este último, detener el proceso iterativo e ir al paso 11. En caso contrario, continuar hacia el próximo paso.
6. Resolver numéricamente el problema adjunto (3.21) por medio del MEF utilizando  $\mathbf{h}_r^{(k)}$  para obtener la aproximación discreta  $\Lambda_r^{(k)} = [\Lambda_M^{(k)}, \Lambda_{M+1}^{(k)}, \dots, \Lambda_{M+r-1}^{(k)}]^\top$  de  $\Lambda(t) \equiv \lambda(0, t)$  en la frontera activa  $x = 0$ . Luego, computar el gradiente  $\nabla S(\mathbf{h}_r^{(k)})$  con la ecuación (3.22).
7. Computar la aproximación discreta  $\mathbf{d}^{(k)}$  de la dirección de descenso utilizando las expresiones (3.30) y (3.31).
8. Hacer  $\Delta \mathbf{h}_r^{(k)} = \mathbf{d}^{(k)}$  y resolver numéricamente el problema de sensibilidad (3.16) por el



MEF para obtener  $\Delta\Theta_r^{(k)}$  en la ubicación del sensor  $x_s$ .

9. Computar numéricamente el tamaño del paso de tiempo  $\beta^{(k)}$  con la ecuación (3.28) utilizando las cantidades  $\Theta_r^{(k)}$  y  $\Delta\Theta_r^{(k)}$  previamente computadas.
10. Computar una nueva estimación  $\mathbf{h}_r^{(k+1)} = \mathbf{h}_r^{(k)} + \beta^k \mathbf{d}^k$ , incrementar  $k$  en una unidad y retornar el paso 4.
11. Una vez satisfecho el criterio de parada, retener solamente la primera componente  $h_M^{(k)}$  del vector de incógnitas convergido  $\mathbf{h}_r^{(k)}$  y añadirla al final del vector solución que contiene los valores convergidos hasta el instante de tiempo  $t = t_{M-1}$ , dando  $\mathbf{h} = [h_1, h_2, \dots, h_{M-1}, h_M]^T$ . 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  $M + r - 1 = Z$ .

Podemos apreciar que la solución  $h_M$  para el  $M$ -ésimo paso de tiempo depende solamente de las condiciones hasta el paso  $M-1$  y de las mediciones futuras  $\Upsilon_r^{(k)} = [Y_M, Y_{M+1}, \dots, Y_{M+r-1}]^T$ , 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.

El trabajo de [Tourn et al. \(2021c\)](#), reproducido en el anexo A, muestra diversos casos de estudio del método propuesto de estimación de coeficientes de convección transiente en problemas térmicos de conducción de calor tanto unidimensionales como bidimensionales. El principal resultado allí destacado es que el SQNM es capaz de obtener soluciones más estables en comparación al SCGM. Particularmente en configuraciones unidimensionales, el SQNM logró reconstruir adecuadamente el coeficiente de convección en la frontera activa aún en aquellos casos donde la posición del sensor era muy desfavorable. Al mismo tiempo, se mostró que las soluciones encontradas por el método propuesto mostraron ser competitivas comparadas con aquellas obtenidas mediante el algoritmo secuencial de [Beck et al. \(1985\)](#). Por último, se mostró la extensión del método a casos bidimensionales incluyendo múltiples sensores y porciones de frontera con coeficientes de convección desconocidos.

### 3.6. Conclusiones

En este capítulo se presentaron los métodos de estimación inversa de dominio temporal completo y secuenciales para el IHCP, haciendo especial énfasis en estos últimos dada la posibilidad de ser empleados en forma simultánea con la adquisición de datos en un experimento real. Dicha característica hace que los métodos secuenciales sean indicados para implementar estrategias de control en línea de procesos industriales tales como tratamientos térmicos, procesos de mecanizado, soldadura, entre otros. En este contexto, se presentó el método SQNM basado en el SCGM,

el cual incorpora características convenientes de las estrategias de optimización basadas en gradiente en un escenario secuencial. La proposición de tal método derivó en el trabajo de [Tourn et al. \(2021c\)](#), el cual constituye una de las principales contribuciones de esta Tesis al estudio de métodos secuenciales de resolución de problemas térmicos inversos. El trabajo completo es reproducido en el anexo [A](#). La conclusión de tal trabajo es que el SQNM resulta una alternativa válida y confiable para el cómputo secuencial de las incógnitas (ya sea flujos de calor o coeficientes de convección) en problemas térmicos no lineales en una y dos dimensiones.

# Capítulo 4

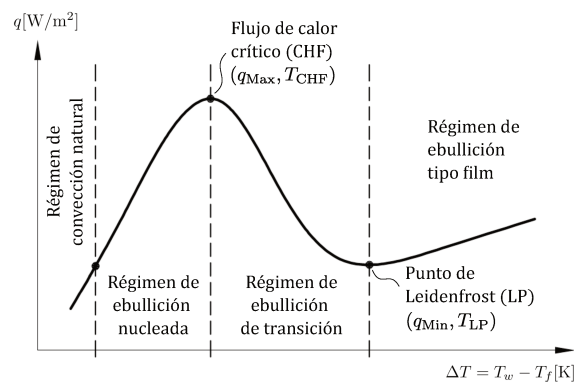
## Caso de estudio

### 4.1. Introducción

La caracterización de fenómenos de transferencia térmica superficial en procesos de tratamiento térmico de metales (Felde y Réti, 2010; Slodička et al., 2010), y particularmente en el caso de obtención de ADI (Vázquez-Gómez et al., 2012), resulta de gran interés tanto para científicos como ingenieros especialistas en dichas prácticas, debido a que permite conocer en detalle las condiciones impuestas sobre un determinado componente sometido a un procedimiento en particular, 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.

Una consecuencia de tal caracterización es la posibilidad de identificar las propiedades principales de la curva de ebullición del líquido que compone el baño del medio enfriante, comúnmente conocida como “curva de Nukiyama” (Lienhard, 2011). La figura 4.1 muestra un esquema de dicha curva en el que se puede apreciar los diferentes regímenes de ebullición que experimenta un fluido frío en contacto con la superficie de un cuerpo a mayor temperatura (Liščić et al., 2013; Lienhard, 2011; Ramesh y Prabhu, 2014). A medida que el cuerpo se enfría, el vapor del líquido generado en las inmediaciones de su superficie adopta diferentes características. Al comienzo (extremo derecho del diagrama) el vapor forma una película o *film* que rodea al cuerpo, cuyo coeficiente de convección es muy bajo; en el denominado “punto de Leidenfrost” (LP, por sus siglas en inglés) el flujo de calor removido de la superficie es mínimo. Al proseguir el enfriamiento (adentrándonos al “régimen de transición”), tal película comienza a romperse y a permitir el “mojado” de la superficie. Esto implica que líquido a menor temperatura entra en contacto con la superficie y genera burbujeo, con lo cual la remoción de calor superficial se incrementa. Al acentuarse este fenómeno debido a la reducción de la temperatura superficial del cuerpo, el burbujeo es cada vez más intenso

hasta el punto donde se alcanza el máximo grado de remoción de calor (“flujo de calor crítico” o CHF, por sus siglas en inglés). Luego de este punto, el fluido experimenta el “régimen de ebullición nucleada” caracterizado por un mojado total de la superficie, y en el que las burbujas se generan directamente en la superficie de la pieza en sitios que favorecen la nucleación y crecimiento de las mismas. Por debajo de tal régimen (extremo izquierdo del diagrama), la superficie de la pieza se encuentra a una temperatura levemente por encima de la temperatura del baño, con lo cual el mecanismo de remoción de calor es debido íntegramente a fenómenos de convección natural. En el enfriamiento por medio de baño de sales característico del tratamiento térmico de austemperado (Pereira et al., 2020; Vázquez-Gómez et al., 2012), la remoción de calor ocurre íntegramente entre los regímenes de ebullición de transición y nucleada.



**Figura 4.1:** Curva de Nukiyama. Se aprecian los diferentes regímenes de ebullición para un amplio rango de valores de  $\Delta T$ , siendo  $T_w$  la temperatura de la superficie de la pieza a enfriar y  $T_f$  la temperatura del medio fluido, y los puntos CHF y LP.

El contenido de este capítulo se basa en el trabajo de Tourn et al. (2021a). Allí se muestra la implementación del SQNM definido en el capítulo 3 en el contexto de un problema de transferencia de calor bidimensional no lineal axisimétrico correspondiente a un proceso de tratamiento térmico de austemperado de una probeta de hierro dúctil para la obtención de ADI. La no linealidad es producto de la dependencia de las propiedades termo-físicas con la temperatura. El objetivo del trabajo es determinar las condiciones de transferencia térmica superficial que tienen lugar durante la etapa de enfriamiento de dicho tratamiento térmico desde la temperatura de austenización hacia la temperatura de austemperado. La reproducción completa de tal publicación se muestra en el anexo C.

## 4.2. Problema térmico directo

Consideremos una geometría bidimensional axisimétrica como la mostrada en la figura 4.2. El modelo matemático de transferencia de calor puede expresarse a través del PVIB dado por el

siguiente sistema de ecuaciones:

$$\rho c(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \kappa(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \kappa(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial z} \right), \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, t > 0 \quad (4.1a)$$

$$\kappa(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = 0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_0, \quad t > 0 \quad (4.1b)$$

$$-\kappa(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = q(t), \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_R, \quad t > 0 \quad (4.1c)$$

$$-\kappa(T) \frac{\partial T(\mathbf{x}, t)}{\partial r} = h[T(\mathbf{x}, t) - T_\infty], \quad \forall \mathbf{x} \in \Gamma_H, \quad t > 0 \quad (4.1d)$$

$$T(\mathbf{x}, 0) = T_0, \quad \forall \mathbf{x} \in \Omega, \quad t = 0, \quad (4.1e)$$

donde  $T(\mathbf{x}, t)$  es la temperatura en el punto  $\mathbf{x} = (r, z) \in \Omega$  en el tiempo  $t$ ,  $\rho c(T)$  y  $\kappa(T)$  son las propiedades termo-físicas del material dependientes de la temperatura,  $\Gamma_0$  la frontera compuesta por el eje de simetría de revolución (coincidente con el eje  $z$ ) y por el plano de simetría en sentido vertical,  $\Gamma_R$  la frontera lateral 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 el coeficiente de transferencia térmica superficial  $h$  y la temperatura del medio circundante  $T_\infty$  (ambos conocidos), y  $T_0$  es la temperatura en el dominio  $\Omega$  en el instante  $t = 0$ .

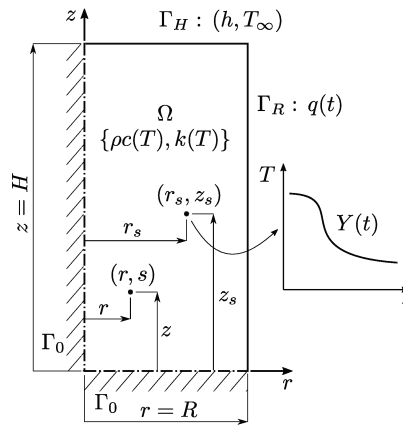


Figura 4.2: Geometría del problema bidimensional axisimétrico.

### 4.3. Problema térmico inverso de conducción de calor

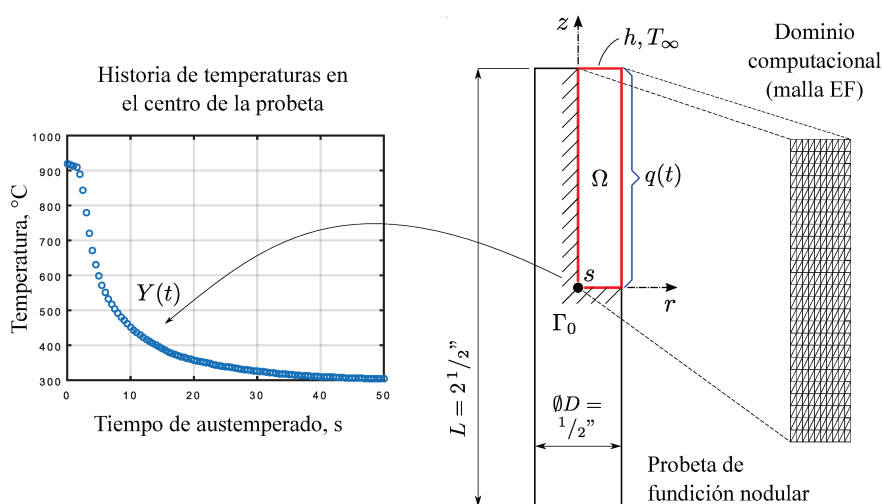
Consideremos ahora que el flujo de calor  $q(t)$  en la ecuación (4.1c) es desconocido, y que al mismo tiempo disponemos de una historia de temperaturas  $Y(t)$  en un determinado punto interior  $s$  (sensor) de la geometría (ver figura 4.2). Dicho punto representa la posición donde se podría instalar una termocupla encargada de registrar las temperaturas en el interior de un cuerpo en un experimento real. El objetivo es estimar la condición de borde  $q(t)$  mediante el método cuasi-Newton secuencial (SQNM) introducido en el capítulo 3, utilizando la historia  $Y(t)$  como dato de

entrada para el modelo.

#### 4.4. Caso de estudio

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 4.3 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 de la condición de borde al primer instante de tiempo (Fachinotti et al., 1999).

Vázquez-Gómez et al. (2012) resuelven el problema adoptando una formulación unidimensional axisimétrica, justificando la unidimensionalidad en virtud de que la relación  $L/D = 5$  es lo suficientemente grande para adoptar dicha 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  $h = 500 \text{ W}/(^{\circ}\text{C} \cdot \text{m}^2)$ .



**Figura 4.3:** Geometría del problema, malla de elementos finitos, e historia de temperaturas  $Y(t)$  en el punto  $s$  según Vázquez-Gómez et al. (2012).

Las propiedades termo-físicas del hierro dúctil empleado en el estudio, particularmente la

conductividad  $\kappa$  y el calor específico volumétrico efectivo  $\rho c_{ef}$  (que incluye el calor latente del cambio de fase sólido-sólido), ambos en función de la temperatura, han sido extraídas del trabajo de Bayati y Elliott (1999). El empleo del  $\rho c_{ef}$  permite emplear la misma formulación del MEF definida en la sección 2.2 sin necesidad de recurrir a la implementación de un término fuente adicional para modelar el cambio de fase.

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  $Z = 150$  pasos de tiempo para discretizar el dominio temporal  $t \in [0, 50]$ , con lo cual resulta  $\Delta t = 0.3$  segundos. El desempeño del SQNM se evaluará a través de la siguiente fórmula de la raíz cuadrada del error cuadrático medio (RMSE, por sus siglas en inglés):

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{Z} \sum_{m=1}^Z [q_{ex}(t_m) - q_{est}(t_m)]^2}, \quad (4.2)$$

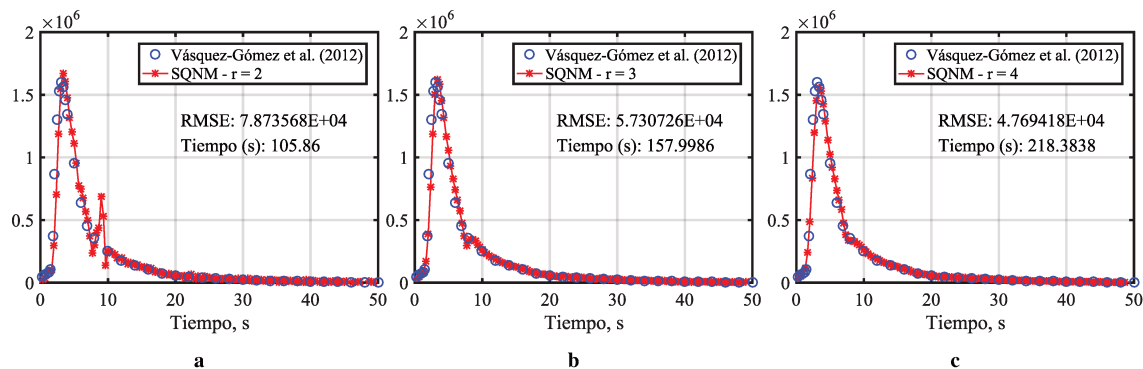
donde  $q_{ex}(t_m)$  representa el  $m$ -ésimo valor discreto del flujo de calor reportado por Vázquez-Gómez et al. (2012) y  $q_{est}(t_m)$  el correspondiente valor discreto estimado mediante el SQNM.

Por último, evaluaremos la posibilidad de asumir una linearización temporal del problema térmico en el paso N°4 del algoritmo computacional descrito en la sección 4.3 del trabajo de Tourn et al. (2021a), 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.

## 4.5. Resultados y discusión

La figura 4.4 muestra los flujos de calor computados utilizando el SQNM en comparación con el flujo superficial reportado en el trabajo de Vázquez-Gómez et al. (2012) tomado como referencia, para los casos considerados. En ella se aprecian también los valores del error según la ecuación (4.2) 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., 2021c). 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 4.4:** Flujo de calor (en  $W/m^2$ ) obtenido con el SQNM 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 fuerte no linealidad 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., 2021c).

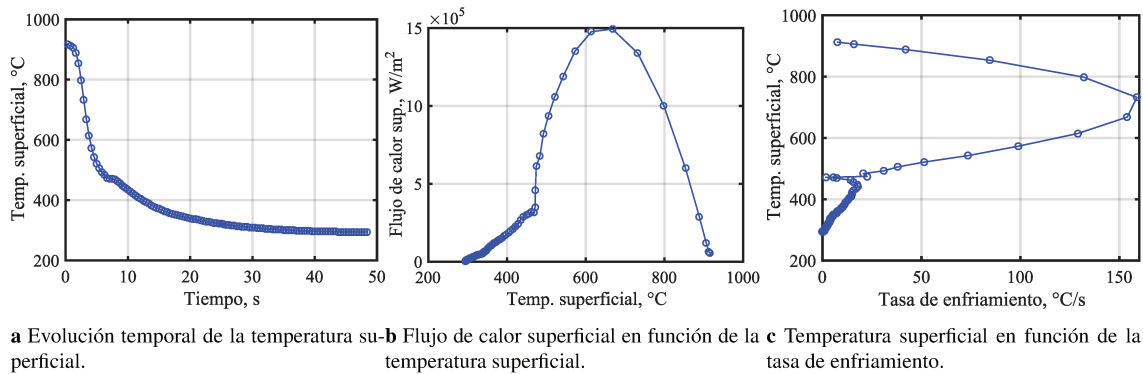
#### 4.5.1. Caracterización de la curva de ebullición

Se observa en las figuras 4.4a-4.4c que la máxima remoción de calor en la pieza ocurre en los primeros 5 segundos del experimento y de forma muy pronunciada. Luego, desciende hasta que se alcanza el equilibrio entre el baño y la probeta. En consecuencia, el baño de sales es capaz de producir un enfriamiento muy rápido y uniforme.

La caracterización del medio que realiza el enfriamiento se completa mediante la construcción de dos curvas: i) la curva que relaciona la temperatura y el flujo superficiales del componente (curva de Nukiyama (Lienhard, 2011)), y ii) la curva de tasa de remoción de calor en función de la temperatura superficial. Las magnitudes requeridas para construir cada figura son computadas luego de resolver el problema térmico directo (4.1) con el flujo de calor estimado en la sección an-



terior (utilizando  $r = 3$  pasos de tiempo futuros) en lugar de  $q(t)$  en la expresión (4.1c). La figura 4.5a muestra la temperatura superficial obtenida, mientras que las figuras 4.5b y 4.5c corresponden a las gráficas de las curvas i) y ii), respectivamente.



**Figura 4.5:** Curvas de temperatura y flujos superficiales medidas en el punto  $r = R$  y  $z = 0$ .

Se observa en la figura 4.5b que la remoción de calor ocurre entre los regímenes de ebullición de transición y ebullición nucleada (comparar con figura 4.1) en el rango 450-900°C, obteniéndose el valor máximo de flujo de calor cercano a los 700°C (Vázquez-Gómez et al., 2012). Este hecho se encuentra en concordancia con lo expresado por Liščić et al. (2013) y Rao y Prabhu (2020) en relación a la capacidad del baño de sales de proveer estas vigorosas condiciones de enfriamiento, evitando el régimen de ebullición tipo *film*. Al alcanzarse temperaturas inferiores a 700°C en la superficie de la probeta, el mecanismo de remoción de calor comienza a ser controlado cada vez más por el régimen de convección natural. Al alcanzarse en la pieza la temperatura de ebullición del baño, aproximadamente en torno a los 450°C, el mecanismo de enfriamiento es controlado puramente por convección.

La gráfica 4.5c muestra nuevamente que no han ocurrido fenómenos de transferencia de calor en la región de ebullición *film* inmediatamente luego de la inmersión en el baño, los cuales son característicos de los procesos de enfriamiento en baños de líquidos evaporables como agua o aceite (Ramesh y Prabhu, 2014; Liščić et al., 2013). La tasa de remoción de calor máxima es superior a los 150°C/s alrededor de los 700°C. En la zona de los 450°C, la curva experimenta un comportamiento que no está asociado a un fenómeno físico, sino que es causado por la presencia de una oscilación espuria en el flujo de calor estimado mediante el SQNM. Sin embargo, el transitorio correspondiente a tal comportamiento es de muy corta duración. Luego de este rango, la tasa de enfriamiento es muy baja, propia de la etapa de ebullición en régimen convectivo.

## 4.6. Conclusiones

En este capítulo se mostraron los resultados de la aplicación del método cuasi-Newton secuencial (SQNM) para caracterizar un flujo de calor superficial en una probeta de hierro dúctil sometida a un tratamiento térmico de austemperado. Dicha aplicación fue posible luego de extender la implementación básica del método dada en el capítulo 3 hacia problemas de transferencia de calor bidimensional no lineales en presencia de una condición geométrica de axisimetría. La principal conclusión en el marco de esta Tesis es que los métodos inversos permiten caracterizar las condiciones de enfriamiento superficial en un cuerpo, con lo cual no sólo es posible identificar efectos transitorios relacionados a los complejos fenómenos de transferencia de calor que tienen lugar durante la inmersión de un cuerpo en un baño (de sales en este caso), sino que también permite mejorar los modelos numéricos existentes a través de un modelado adecuado de dichas condiciones de enfriamiento.

## Capítulo 5

# Conclusiones

A diferencia del enfoque abordado típicamente en la bibliografía, donde el desarrollo de estrategias de control de procesos para la obtención de ADI se encuentra íntimamente vinculado al estudio de las variables que controlan su evolución microestructural y su relación con propiedades mecánicas de interés, esta Tesis se centralizó en el estudio de la etapa de enfriamiento del tratamiento térmico de austemperado como parte del proceso industrial de obtención de ADI, la cual resulta crítica para el éxito del tratamiento térmico. Puntualmente, se examinaron los fenómenos de transferencia térmica superficial que tienen lugar durante dicha etapa mediante el uso de métodos inversos computacionales. Tales métodos permiten estimar el comportamiento transiente de las condiciones de borde en un problema de conducción de calor planteado en la geometría de una pieza en particular, utilizando para ello mediciones de temperaturas tomadas en el interior de la pieza. La finalidad perseguida por este enfoque fue la de proveer herramientas computacionales especialmente diseñadas para permitir la caracterización de los fenómenos de transferencia de calor superficial imperantes, proporcionando así la posibilidad de implementar técnicas de monitoreo y control adecuadas para mejorar las condiciones físicas que producen el enfriamiento.

Para emplear dichas técnicas, en primer lugar se estudiaron los fundamentos matemáticos de los problemas inversos continuos. Durante este análisis, se estudió la factibilidad de emplear funciones de penalidad de variación total, típicamente empleadas en problemas de reconstrucción de imágenes y señales digitales, como estrategia de regularización en problemas térmicos inversos de conducción de calor. Dicho estudio constituye uno de los aportes de esta Tesis en el desarrollo de herramientas computacionales para problemas térmicos inversos lineales. El texto completo de la publicación científica correspondiente (Tourn et al., 2021b) derivada de tal implementación es reproducido en el anexo B.

Luego, se desarrolló una estrategia de resolución inversa secuencial denominada SQNM que permite el cómputo de las incógnitas de un problema térmico inverso, puntualmente la función

transiente del flujo de calor superficial o el coeficiente de convección que actúa en una determinada frontera de un dominio bi-dimensional. El cómputo de la dirección de descenso empleando la estrategia cuasi-Newton BFGS en lugar de la técnica de gradiente conjugado tradicional permitió la obtención de reconstrucciones más estables, aún en escenarios muy desfavorables para el algoritmo de cálculo, como por ejemplo la estimación de condiciones de borde partiendo de información de temperatura en ubicaciones lejanas a la frontera donde se realiza el intercambio térmico. La implementación de este método constituye otro de los aportes fundamentales de esta Tesis en relación a técnicas de estimación inversa en problemas térmicos inversos en presencia de no linealidades. Los detalles de la implementación y los resultados de su aplicación en varios casos de estudio puede encontrarse en la publicación científica correspondiente (Tourn et al., 2021c) reproducida íntegramente en el anexo A.

Posterior a la implementación de las herramientas computacionales mencionadas tanto para problemas térmicos lineales como no lineales, se comprobó la posibilidad de evidenciar los fenómenos de transferencia térmica superficial imperantes durante la etapa de enfriamiento de un tratamiento térmico de austemperado de una pieza de hierro dúctil, mediante la aplicación de la estrategia SQNM desarrollada como parte de los aportes originales de esta Tesis. Esto dio lugar a la publicación de Tourn et al. (2021a) transcrita en el anexo C. Allí fue posible caracterizar el fenómeno de transferencia térmica superficial durante el período transitorio que tiene lugar entre las temperaturas de austenización y austemperado y obtener una estimación razonable de las condiciones de borde, como también identificar los regímenes de ebullición que experimenta el fluido enfriante en inmediaciones de la pieza al producir la inmersión de esta en el baño.

Las herramientas computacionales propuestas permitieron revelar detalles fundamentales de los fenómenos físicos que tienen lugar en la superficie de una pieza durante la etapa de enfriamiento del proceso industrial de obtención de ADI, con lo cual no sólo fue posible caracterizar tales fenómenos, sino también contar con un monitoreo en tiempo cuasi-real del proceso. En consecuencia, resulta técnicamente viable la implementación de estrategias de control sobre las variables que gobiernan dicho proceso.

## 5.1. Publicaciones científicas

El siguiente es un listado de las contribuciones científicas derivadas de los estudios abordados durante el desarrollo de la presente Tesis.

**5.1.1. Publicaciones en revistas internacionales con referato**

1. Tourn, B. A., Álvarez Hostos, J. C., & Fachinotti, V. D. (2021). 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. (Tourn et al., 2021c)
2. Tourn, B. A., Álvarez Hostos, J. C., & Fachinotti, V. D. (2021). Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear inverse heat conduction problems concerning the estimation of surface heat fluxes. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 125, 105330. (Tourn et al., 2021b)
3. Álvarez Hostos, J. C., Fachinotti, V. D., Peralta, I., & Tourn, B. A. (2019). Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 76(8), 648-663. (Álvarez Hostos et al., 2019)
4. Álvarez Hostos, J. C., Bencomo, A. D., Puchi-Cabrera, E. S., Fachinotti, V. D., Tourn, B., & Salazar-Bove, J. C. (2019). Implementation of a standard stream-upwind stabilization scheme in the element-free Galerkin based solution of advection-dominated heat transfer problems during solidification in direct chill casting processes. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 106, 170-181. (Álvarez-Hostos et al., 2019)

**5.1.2. Publicaciones y presentaciones en congresos**

1. Tourn, B. A., Álvarez Hostos, J. C., & Fachinotti, V. D. Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso Quasi-Newton secuencial. XXXVIII Congreso argentino de mecánica computacional (MECOM 2021)(Resistencia, Chaco, 1 al 5 de noviembre 2021). (Tourn et al., 2021a)
2. Fachinotti, V., Tourn, B., & Álvarez Hostos, J. C. (2018). Density-based Topology Optimization for Heat Conduction with Convection Boundary Conditions. *Mecánica Computacional*, 36(48), 2221-2221. (Fachinotti et al., 2018)
3. Tourn, B. A., Albanesi, A. E., & Fachinotti, V. D. (2017). Problema térmico inverso de conducción de calor aplicado al tratamiento térmico de austemperado usando optimización basada en simulaciones. In XXIII Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones (ENIEF 2017)(La Plata, 7 al 10 de noviembre 2017). (Tourn et al., 2017)



## Capítulo 6

# Trabajos futuros

El siguiente es un listado de ideas conceptuales, implementaciones particulares y aplicaciones que quedaron fuera del alcance de esta Tesis y que pueden ser contempladas en trabajos futuros, como así también nuevas líneas de investigación derivadas del trabajo de esta Tesis que el autor considera de interés, aunque no se encuentran en orden cronológico:

1. **Extensión de los modelos desarrollados en esta Tesis para el tratamiento de geometrías complejas.** Los modelos desarrollados en esta Tesis incluyen formulaciones en una y dos dimensiones sobre geometrías simples. La extensión de dichos modelos a problemas tridimensionales no sólo es prácticamente inmediata, sino también necesaria para el abordaje de problemas reales de ingeniería. Sin embargo, esta extensión introduce nuevos desafíos en el ámbito de los problema térmicos inversos vinculados a varios factores. La ubicación de los puntos internos en los cuales registrar la temperatura constituiría un problema en sí mismo. A su vez, puede ser necesaria la partición de la frontera externa en un gran número de sub-regiones independientes en las que computar las incógnitas del problemas, con lo cual sería imprescindible la instalación de mayor cantidad de sensores dentro de la pieza. Esta necesidad da lugar a una serie de inconvenientes: i) el enorme crecimiento del costo computacional de determinar simultáneamente gran cantidad de incógnitas, y a la vez el crecimiento del número de incógnitas en relación a los datos de entrada del modelo; ii) la necesidad de estudiar el concepto de “distancia térmica” (Helmig et al., 2020) de los sensores respecto a la frontera cuyas propiedades de transferencia de calor superficiales son desconocidas; iii) la viabilidad tecnológica de la instalación de múltiples sensores en el seno de una pieza; iv) la extrema mal colocación del problema resultante; entre otros, son algunos de los obstáculos a resolver.
2. **Desarrollo de una estrategia para el tratamiento de problemas térmicos inversos con**

**mayor número de incógnitas que datos de entrada.** El método de regularización conocido como “red elástica” (Zou y Hastie, 2005) permite hallar los parámetros de un modelo de regresión en aquellos casos donde no sólo el número de incógnitas es muy superior a la cantidad de datos disponibles en el modelo, sino que también existe una elevada correlación entre las variables del modelo. En el contexto de problemas térmicos inversos de conducción de calor aplicados al control y/o diseño de tratamientos térmicos de metales, el escenario anteriormente descrito se materializa en el caso donde, mediante un modelo de regresión, se desean estimar simultáneamente un gran número de parámetros de transferencia de calor superficial en distintas posiciones de la frontera exterior de una pieza, contando un número muy reducido de sensores (termocuplas) en el interior del cuerpo, idealmente un único sensor. La correlación resulta evidente en el hecho que varias porciones de la frontera externa del cuerpo están sometidas a condiciones de transferencia de calor semejantes. La configuración mencionada (datos provenientes de un sólo sensor + gran número de incógnitas) es de gran interés en el ámbito industrial de tratamiento térmico de metales, dado que permitiría optimizar el proceso de transferencia térmica superficial en aquellos casos donde se requiera una respuesta térmica específica en determinadas ubicaciones internas de un cuerpo sometido a tal proceso.

### 3. Desarrollo de sistemas de enfriamiento superficial óptimo basado en métodos inversos.

El modelado adecuado del fenómeno de transferencia térmica superficial que tiene lugar durante un proceso de enfriamiento de una pieza a elevada temperatura permite conocer en detalle las características principales de dicho fenómeno, identificando los distintos regímenes de ebullición que tienen lugar en la interfaz entre el cuerpo y el medio que produce el enfriamiento (Liang y Mudawar, 2017a). En el caso del tratamiento térmico de austemperado, la inmersión en baño de sales ofrece tasas de remoción de calor elevadas en virtud de que el fenómeno de ebullición del baño en la superficie de la pieza ocurre entre los regímenes de ebullición nucleada y de transición (Liščić et al., 2013). Una forma alternativa de alcanzar niveles de transferencia térmica muy elevados es mediante el uso de arreglos de boquillas que permiten impactar un líquido atomizado a gran velocidad sobre la superficie a enfriar (Liang y Mudawar, 2017b; Mascarenhas y Mudawar, 2010). La ventaja de esta técnica radica en las posibilidades de controlar con mayor precisión los parámetros de proceso tales como presión de trabajo, tamaño de gotas impactadas, características de la boquilla, forma del *spray* al impactar con la superficie, distancia de la boquilla a la superficie, entre otros, con lo cual es posible lograr enfriamientos más intensos, controlados, y repetibles sobre la pieza. En consecuencia, es posible diseñar instalaciones especialmente concebidas



para el tratamiento térmico de austemperado mediante la disposición adecuada de arreglos de boquillas, utilizando métodos inversos térmicos para ajustar los parámetros del proceso. Los trabajos de [Deiters y Mudawar \(1989\)](#) y [Mascarenhas y Mudawar \(2010\)](#) constituyen un ejemplo del diseño de esta clase de instalaciones para el enfriamiento de piezas de geometría compleja.

- 4. Implementación de una estrategia de regularización de variación total de orden superior.** Los resultados de la implementación de una estrategia de regularización de variación total de primer orden para el problema térmico inverso lineal unidimensional (ver anexo B), indican que los flujos de calor superficial estimados adoptan una forma discontinua a trozos en virtud del denominado “efecto escalera” ([Mueller y Siltanen, 2012](#)), la cual no resulta adecuada para la reconstrucción de funciones suaves. Sin embargo, la implementación de estrategias de variación total de orden superior elimina dicho efecto ([Chan et al., 2000](#)), permitiendo obtener reconstrucciones precisas de funciones ya sean suaves o discontinuas. A su vez, se pretende extender tanto la estrategia de variación total discutida en el anexo B) como la de orden superior a problemas térmicos inversos no lineales.



# Bibliografía

## Bibliografía

- Aamir M., Liao Q., Zhu X., Wang H., Zubair M., et al. Estimation of surface heat flux and surface temperature during inverse heat conduction under varying spray parameters and sample initial temperature. *The Scientific World Journal*, 2014, 2014.
- Abdelhamid T., Elsheikh A., Elazab A., Sharshir S., Selima E.S., y Jiang D. Simultaneous reconstruction of the time-dependent Robin coefficient and heat flux in heat conduction problems. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 26(9):1231–1248, 2018.
- Achary J. y Venugopalan D. Microstructural development and austempering kinetics of ductile iron during thermomechanical processing. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 31(10):2575–2585, 2000.
- Ali S., Hamed M., y Lightstone M. A modified online input estimation algorithm for inverse modeling of steel quenching. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 57(1):1–29, 2010.
- Alifanov O.M. *Inverse Heat Transfer Problems*. Springer, 1994.
- Álvarez-Hostos J.C., Bencomo A.D., Puchi-Cabrera E.S., Fachinotti V.D., Tourn B., y Salazar-Bove J.C. Implementation of a standard stream-upwind stabilization scheme in the element-free Galerkin based solution of advection-dominated heat transfer problems during solidification in direct chill casting processes. *Engineering Analysis with Boundary Elements*, 106:170–181, 2019.
- Asociación de Industriales Metalúrgicos de la República Argentina (ADIMRA). Programa de Fortalecimiento de Proveedores de la Industria Ferroviaria. 2016.
- Aster R.C., Borchers B., y Thurber C.H. *Parameter estimation and inverse problems*. Elsevier, 2018.
- ASTM A897 / A897M-16. Standard Specification for Austempered Ductile Iron Castings. West Conshohocken, PA, 2016.
- Babu K. y Kumar T.P. Mathematical modeling of surface heat flux during quenching. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 41(1):214–224, 2010.
- Batra U., Ray S., y Prabhakar S.R. Mathematical model for austenitization kinetics of ductile iron. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 14(5):574–581, 2005.
- 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.
- Beck J.V. y Woodbury K.A. Inverse heat conduction problem: sensitivity coefficient insights, filter coefficients, and intrinsic verification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 97:578–588, 2016.
- Beck M., Schmidt C., Ahrenberg M., Schick C., Kragl U., y Keßler O. The ideal quenching medium?—characterisation of ionic liquids for heat treatment of metallic components. *HTM Journal of Heat Treatment and Materials*, 68(5):214–223, 2013.
- Biernacki R., Kozłowski J., Myszkowski D., y Perzyk M. Prediction of properties of austempered ductile iron assisted by artificial neural network. *Materials Science (Medžiagotyra)*, 12(1):11–15, 2006.
- Blackmore P.A. y Harding R.A. The effects of metallurgical process variables on the properties of austempered ductile irons. *Journal of Heat Treating*, 3(4):310–325, 1984.
- Boccardo A.D. *Modelado computacional, termomecánico-metalúrgico, del tratamiento de austemperizado de una fundición nodular*. Tesis de Doctorado, Universidad Nacional de Córdoba, 2017.
- Boccardo A.D., Dardati P., y Godoy L.A. A cellular automaton-finite difference simulation of the ausferritic transformation in ductile iron. *Materials Science and Technology*, 34(14):1710–1722, 2018a.
- Boccardo A.D., Dardati P.M., Celentano D.J., y Godoy L.A. Austempering heat treatment of ductile iron: Computational simulation and experimental validation. *Finite Elements in Analysis and Design*, 134:82–91, 2017a.
- Boccardo A.D., Dardati P.M., Celentano D.J., y Godoy L.A. A microscale model for ausferritic transformation of austempered ductile irons. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 48(1):524–535, 2017b.
- Boccardo A.D., Dardati P.M., y Godoy L.A. Influence of alloy element distributions on austempered ductile irons. *Materials Science and Technology*, 34(17):2153–2165, 2018b.
- Boccardo A.D., Dardati P.M., Godoy L.A., y Celentano D.J. Sensitivity of austempering heat treatment of ductile irons to changes in process parameters. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 49(3):1522–1536, 2018c.
- Boccardo A.D., Sosa A.D., Echeverría M.D., Dardati P.M., Celentano D.J., y Godoy L.A. Numerical simulation of dimensional change during austempering heat treatment in ductile cast iron. En *10th International Symposium on the Science and Processing of Cast Iron (SPCI10)*. INTEMA-UNMdP-CONICET, 2014.
- Boletín Oficial de la República Argentina. Decreto 902/2016: Régimen de Desarrollo y Fortalecimiento del Autopartismo Argentino: Beneficios e Incentivos. 01/08/2016. doi:<https://www.boletinoficial.gob.ar/#!DetalleNormaBusquedaAvanzada/148854/20160801>.
- Boletín Oficial de la República Argentina. Resolución 339 - E/2016: Programa de Desarrollo de Proveedores (PRODEPRO). 22/07/2016.
- Borean J.L., Romberger C., Manga P.S., Petesch T., y Daubigny A. Thermal modeling of the quench at burns harbor utilizing on-line characterization of cooling. *Metallurgical Research & Technology*, 108(3):165–174, 2011.
- Bragachini M. Jornada Agromercado 2003: Análisis de la cadena productiva de la maquinaria agrícola

- Argentina. Informe Técnico, Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria, INTA, Manfredi, Cordoba, Argentina, 2003.
- Bragachini M. y Sánchez F. EXPOAGRO 2016: La maquinaria agrícola Argentina, una mirada al 2025. Informe Técnico, Instituto Nacional de Tecnología Agropecuaria, INTA, Manfredi, Cordoba, Argentina, 2016.
- Bramfitt B.L. y Benschoter A.O. *Metallographer's guide: practice and procedures for irons and steels*. ASM International, 2001.
- Broyden C.G. A new double-rank minimisation algorithm. preliminary report. En *Notices of the American Mathematical Society*, volumen 16, página 670. AMER MATHEMATICAL SOC 201 CHARLES ST, PROVIDENCE, RI 02940-2213, 1969.
- Burggraf O. An exact solution of the inverse problem in heat conduction theory and applications. *Journal of Heat Transfer*, 86(3):373–380, 1964.
- Centro Interdisciplinario de Estudios en Ciencia, Tecnología e Innovación (CIECTI). Complejo automotriz argentino: situación tecnológica, restricciones y oportunidades. informe técnico n°8. 2017.
- Chan T., Marquina A., y Mulet P. High-order total variation-based image restoration. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(2):503–516, 2000.
- Chandrupatla T.R., Belegundu A.D., Ramesh T., y Ray C. *Introduction to finite elements in engineering*, volumen 2. Prentice Hall Upper Saddle River, NJ, 2002.
- Cámara de Industriales Fundidores de la República Argentina. Industria automotriz: efectos sobre la producción de autopartes de hierro fundido. 2011. doi:[http://www.indargen.com.ar/pdf/14/industria\\_auto.pdf](http://www.indargen.com.ar/pdf/14/industria_auto.pdf).
- Colaço M.J., Orlande H.R.B., y Dulikravich G.S. Inverse and optimization problems in heat transfer. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 28(1):1–24, 2006.
- Consejo Federal de Inversiones (CFI). Informe del sector autopartista en la Argentina. 2016.
- de Souza B.V., Ribeiro T.M., Francois A., y dos Santos C.A. Austempering heat treatments of ductile iron using molten metal baths. *Materials and Manufacturing Processes*, 33(15):1667–1673, 2018.
- Deiters T. y Mudawar I. Optimization of spray quenching for aluminum extrusion, forging, or continuous casting. *Journal of Heat Treating*, 7(1):9–18, 1989.
- Dorzil E., Barta B., Munsterova E., Stransky L., y Huvar A. High-strength bainitic ductile cast iron. *Int. Cast Met. J.*, 7(2):52–62, 1982.
- Dowding K. y Beck J. A sequential gradient method for the inverse heat conduction problem (IHCP). *Journal of heat transfer*, 121(2):300–306, 1999.
- Downes N.R. y Kraemer D.M. Cuaderno Tecnológico N°9: Fundición nodular de alto rendimiento. Informe Técnico, Instituto Nacional de Tecnología Industrial INTI, 2014.
- Echeverría M., Moncada O., y del Plata M. Efectos de la microestructura previa, relaciones geométricas y anisotropía, en la variación dimensional de ADI. 2000.
- Eldén L. An efficient algorithm for the regularization of ill-conditioned least squares problems with triangular Toeplitz matrix. *SIAM Journal on scientific and statistical computing*, 5(1):229–236, 1984.
- Engl H.W., Hanke M., y Neubauer A. *Regularization of inverse problems*, volumen 375. Springer Science & Business Media, 1996.

- Fachinotti V., Tourn B., y Álvarez Hostos J.C. Density-based topology optimization for heat conduction with convection boundary conditions. *Mecánica Computacional*, 36(48):2221–2221, 2018.
- 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.
- Farahani S.D. y Kisomi M.S. Experimental estimation of temperature-dependent thermal conductivity coefficient by using inverse method and remote boundary condition. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 117:104736, 2020.
- Felde I. y Réti T. Evaluation of hardening performance of cooling media by using inverse heat conduction methods and property prediction. *Strojnikski vestnik–Journal of Mechanical Engineering*, 56(2):77–83, 2010.
- Fernandino D.O., Boeri R.E., Di Cocco V., Bellini C., y Iacoviello F. Damage evolution during tensile test of austempered ductile iron partially austenized. *Material Design & Processing Communications*, 2(4):e157, 2020a.
- Fernandino D.O., Di Cocco V., Boeri R.E., y Iacoviello F. Microstrain measurements and damage analysis during tensile loading of intercritical austempered ductile iron. *Fatigue & Fracture of Engineering Materials & Structures*, 43(11):2744–2755, 2020b.
- Fletcher R. A new approach to variable metric algorithms. *The computer journal*, 13(3):317–322, 1970.
- Fletcher R. y Reeves C.M. Function minimization by conjugate gradients. *The computer journal*, 7(2):149–154, 1964.
- Fraś E. y Górný M. Thin wall austempered ductile iron (TWADI). *Arch Found Eng*, 9(3):45–48, 2009.
- Fundación de Investigaciones para el desarrollo (FIDE). La industria de la fundición en la República Argentina: estado actual y propuestas para su afianzamiento y desarrollo. 2017. doi:<http://www.fundidores.org.ar/wp-content/uploads/2018/01/INDUSTRIA-DE-LA-FUNDICION-TRABAJO-FIDE.pptx>.
- Goldfarb D. A family of variable-metric methods derived by variational means. *Mathematics of computation*, 24(109):23–26, 1970.
- Gorenstein S. y Moltoni L. Conocimiento, aprendizaje y proximidad en aglomeraciones industriales periféricas. estudio de caso sobre la industria de maquinaria agrícola en la argentina. *Investigaciones Regionales–Journal of Regional Research*, (20):73–92, 2011.
- Guo X. Correlation between austempering parameters and hardness of austempered ductile iron based on artificial neural network. *Computer Modeling & New Technologies*, 18:72–76, 2014.
- Hadamard J. Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Princeton university bulletin*, páginas 49–52, 1902.
- Hall D.D. y Mudawar I. Experimental and numerical study of quenching complex-shaped metallic alloys with multiple, overlapping sprays. *International journal of heat and mass transfer*, 38(7):1201–1216, 1995.
- Hammood A.S. y Lieth H.M. A study the effect of retained austenite on fatigue life of austempering ductile iron by using artificial neural networks. *Matrix*, 170:207, 2013.
- Hansen P.C. *Rank-deficient and discrete ill-posed problems: numerical aspects of linear inversion*, volu-

- men 4. Siam, 2005.
- Harding R.A. Austempered ductile-iron castings: advantages, production, properties and specifications. *BCIRA Report, The Cast Metals Technology Centre, Birmingham B48 7QB, UK*, 1991.
- Helmig T., Al-Sibai F., y Kneer R. Estimating sensor number and spacing for inverse calculation of thermal boundary conditions using the conjugate gradient method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 153:119638, 2020.
- Hestenes M.R., Stiefel E., et al. *Methods of conjugate gradients for solving linear systems*, volumen 49. NBS Washington, DC, 1952.
- Huang S., Tao B., Li J., Fan Y., y Yin Z. On-line estimation of the tool-chip interface temperature field during turning using a sequential inverse method. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 97, 2018.
- Huntul M. y Lesnic D. An inverse problem of finding the time-dependent thermal conductivity from boundary data. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 85:147–154, 2017.
- Janowak J.F. y Gundlach R.B. Development of a Ductile Iron for Commercial Austempering. *Transactions of the American Foundrymen's Society.*, 91:377–388, 1983.
- Joachimiaik M., Joachimiaik D., Ciałkowski M., Małdziński L., Okoniewicz P., y Ostrowska K. Analysis of the heat transfer for processes of the cylinder heating in the heat-treating furnace on the basis of solving the inverse problem. *International Journal of Thermal Sciences*, 145:105985, 2019.
- Keough J.R., Hayrynen K.L., y Pioszak G.L. Designing with austempered ductile iron (ADI). *AFS Proceedings*, páginas 1–15, 2010.
- Kim S., Chung B.J., Kim M.C., y Kim K.Y. Inverse estimation of temperature-dependent thermal conductivity and heat capacity per unit volume with the direct integration approach. *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, 44(5):521–535, 2003a.
- 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, 2003b.
- Kim S.K., Lee W.I., y Lee J.S. Solving a nonlinear inverse convection problem using the sequential gradient method. *KSME international journal*, 16(5):710–719, 2002.
- Lamm P.K. Future-sequential regularization methods for ill-posed volterra equations: Applications to the inverse heat conduction problem. *Journal of mathematical analysis and applications*, 195(2):469–494, 1995.
- LeBreux M., Desilets M., y Lacroix M. An unscented Kalman filter inverse heat transfer method for the prediction of the ledge thickness inside high-temperature metallurgical reactors. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 57(1):265–273, 2013.
- Lewis R.W., Nithiarasu P., y Seetharamu K.N. *Fundamentals of the finite element method for heat and fluid flow*. John Wiley & Sons, 2004.
- Liang G. y Mudawar I. Review of spray cooling—part 1: Single-phase and nucleate boiling regimes, and critical heat flux. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 115:1174–1205, 2017a.
- Liang G. y Mudawar I. Review of spray cooling—part 2: High temperature boiling regimes and quenching

- applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 115:1206–1222, 2017b.
- Lienhard J.H. *A heat transfer textbook*. Courier Corporation, 2011.
- Ling X., Keanini R.G., y Cherukuri H. A non-iterative finite element method for inverse heat conduction problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 56(9):1315–1334, 2003.
- Liščić B. y Filetin T. Measurement of quenching intensity, calculation of heat transfer coefficient and global database of liquid quenchants. *Materials Engineering-Materiálové inžinierstvo (MEMI)*, 19(2):52–63, 2012.
- Liščić B., Tensi H.M., y Luty W. *Theory and Technology of Quenching: a Handbook*. Springer Science & Business Media, 2013.
- Liu F.B. A hybrid method for the inverse heat transfer of estimating fluid thermal conductivity and heat capacity. *International Journal of Thermal Sciences*, 50(5):718–724, 2011.
- Álvarez Hostos J.C., Fachinotti V.D., Peralta I., y Tourn B.A. Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 76(8):648–663, 2019.
- Martinez R., Boeri R., y Sikora J. Application of ADI in high strength thin wall automotive parts. En *Proc. of the 2002 World Conf. on ADI. AFS*, páginas 144–148. 2002.
- Mascarenhas N. y Mudawar I. Analytical and computational methodology for modeling spray quenching of solid alloy cylinders. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 53(25-26):5871–5883, 2010.
- Ministerio de Ciencia, Tecnología e Innovación Productiva (MinCyT). Plan Argentina Innovadora 2020. Mesa de implementación Sector Autopartista: Documento de referencia. 2013.
- Ministerio de Ciencia, Tecnología, e Innovación Productiva (MinCyT). Argentina Innovadora 2020: Plan Nacional de Ciencia, Tecnología, e Innovación; Lineamientos Estratégicos 2012-2015. 2012. doi:<http://www.mincyt.gov.ar/adjuntos/archivos/000/022/0000022576.pdf>.
- Ministerio de Hacienda - Presidencia de la Nación. Informes Productivos Provinciales - Santa Fe. 2017.
- Ministerio de Hacienda y Finanzas Públicas - Presidencia de la Nación. Informes de cadenas de valor: Maquinaria Agrícola. 2016.
- Ministerio del Interior y Transporte. Plan Operativo Quinquenal 2016-2020: Nuevos Ferrocarriles Argentinos. 2016.
- Ministro de Economía - Secretaría de Planificación y Política Económica. Informe del sector de maquinaria agrícola de la provincia de Santa Fe. 2015.
- Mohebbi F., Evans B., Shaw A., y Sellier M. An inverse analysis for determination of space-dependent heat flux in heat conduction problems in the presence of variable thermal conductivity. *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics*, 20(3):229–241, 2019.
- Molavi H., Rezapour J., Noori S., Ghasemloo S., y Aslani K.A. Novel gradient-based methods for heat flux retrieval. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 2013.
- Moore D.J., Rouns T.N., y Rundman K.B. Effect of manganese on structure and properties of austempered ductile iron: A processing window concept. *Transactions of the American Foundrymen's Society.*, 94:255–264, 1986.
- Mueller J.L. y Siltanen S. *Linear and nonlinear inverse problems with practical applications*, volumen 10.



- Siam, 2012.
- Nallathambi A.K. y Specht E. Estimation of heat flux in array of jets quenching using experimental and inverse finite element method. *Journal of Materials Processing Technology*, 209(12-13):5325–5332, 2009.
- Nejad A.A., Maghrebi M., y Tabrizi H.B. Effect of sensor locations on the solution of inverse Stefan problems. *Mechanika/Mechanics*, 83(3):51–57, 2010a.
- Nejad A.A., Maghrebi M.J., Tabrizi H.B., Heng Y., Mhamdi A., y Marquardt W. Optimal operation of alloy material in solidification processes with inverse heat transfer. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37(6):711–716, 2010b.
- Nocedal J. y Wright S. *Numerical optimization*. Springer Science & Business Media, 2006.
- Nofal A. y Jekova L. Novel processing techniques and applications of austempered ductile iron. *Journal of the University of Chemical Technology and Metallurgy*, 44(3):213–228, 2009.
- Norouzifard V. y Hamedí M. A three-dimensional heat conduction inverse procedure to investigate tool–chip thermal interaction in machining process. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 74(9-12):1637–1648, 2014.
- Observatorio Permanente del Sector Fundidor. La industria de la Fundición en Argentina y el mundo. 2019.
- Osman A. y Beck J. Investigation of transient heat transfer coefficients in quenching experiments. *Journal of Heat Transfer*, 112(4):843–848, 1990.
- Ozisk M.N. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. CRC Press, 2000.
- Pereira L., do Amaral R.F., Júnior M.W., y de Barcellos V.K. Microstructural and mechanical properties of Cu-Ni-Mn-Mo austempered ductile iron obtained from two-step hot air austempering. *Journal of Materials Research and Technology*, 9(3):3055–3063, 2020.
- Perzyk M., Kochański A., y Kozłowski J. Control of ductile iron austempering process by advanced data driven modeling. En *Proceedings of 71st World Foundry Congress*, páginas 1–11. 2014.
- Phillips D.L. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. *Journal of the ACM (JACM)*, 9(1):84–97, 1962.
- Polyanin A.D. y Manzhirov A.V. *Handbook of integral equations*. Chapman and Hall/CRC, 2008.
- PourAsiabi H., PourAsiabi H., AmirZadeh Z., y BabaZadeh M. Development a multi-layer perceptron artificial neural network model to estimate the vickers hardness of Mn-Ni-Cu-Mo austempered ductile iron. *Materials & Design*, 35:782–789, 2012.
- Ramesh G. y Prabhu K.N. Assessment of axial and radial heat transfer during immersion quenching of Inconel 600 probe. *Experimental thermal and fluid science*, 54:158–170, 2014.
- Rao K.P. y Prabhu K.N. Compositional and bath temperature effects on heat transfer during quenching in molten NaNO<sub>3</sub>-KNO<sub>3</sub> salt mixtures. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 29(3):1860–1868, 2020.
- Reinhardt H.J. y Hào D.N. A sequential conjugate gradient method for the stable numerical solution to inverse heat conduction problems. *Inverse Problems in Engineering*, 2(4):263–272, 1996.
- Rogalewicz M. y Sika R. Methodologies of knowledge discovery from data and data mining methods in mechanical engineering. *Management and Production Engineering Review*, 2016.

- Rudin L.I., Osher S., y Fatemi E. Nonlinear total variation based noise removal algorithms. *Physica D: nonlinear phenomena*, 60(1-4):259–268, 1992.
- Rundman K.B., Moore D.J., Hayrynen K.L., Dubensky W.J., y Rouns T.N. The microstructure and mechanical properties of austempered ductile iron. *Journal of Heat Treating*, 5(2):79–95, 1988.
- Samadi F., Kowsary F., y Sarchami A. Estimation of heat flux imposed on the rake face of a cutting tool: a nonlinear, complex geometry inverse heat conduction case study. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 39(2):298–303, 2012.
- Savangouder R.V., Patra J.C., y Bornand C. Artificial neural network-based modeling for prediction of hardness of austempered ductile iron. En *International Conference on Neural Information Processing*, páginas 405–413. Springer, 2019.
- Shahbaz M., Masood S.A., Shaheen M., y Khan A. Data mining methodology in perspective of manufacturing databases. *Journal of American Science*, 6(11):999–1012, 2010.
- Shanno D.F. Conditioning of quasi-Newton methods for function minimization. *Mathematics of computation*, 24(111):647–656, 1970.
- Shewchuk J.R. et al. An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain. 1994.
- Sica D., Scarlan M., D.E.Rossini, Beinstein J., y Figueroa D. El futuro del sector automotriz en el mundo [2025]: fuerza impulsoras y tecnologías clave para su desarrollo en el marco de políticas que promuevan la calidad de vida y la conservación del medio ambiente y de los recursos naturales. Informe Técnico, Ministerio de Tecnología e Innovación Productiva, MINCYT, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Buenos Aires, Argentina, 2012.
- Skubisz P. y Adrian H. Estimation of heat transfer coefficient of forced-air cooling and its experimental validation in controlled processing of forgings. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 73(3):163–176, 2018.
- 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.
- Sohi M., Heydarzadeh, Nili-Ahmadabadi M., Bahrami Vahdat A., y Amirsadeghi A. Evaluation of the role of alloying elements in austemperability of heavy section ductile iron. En *Advanced Materials Research*, volumen 83, páginas 481–487. Trans Tech Publ, 2010.
- Sosa A.D., Rosales C.S., Boeri R.E., y Simison S.N. Corrosion mechanisms in ADI parts. *International Journal of Cast Metals Research*, 29(1-2):106–111, 2016.
- Stefanescu D.M., Dix L.P., Ruxanda R.E., Corbitt-Coburn C., y Pivonka T.S. Tensile properties of thin wall ductile iron. *AFS Transactions*, 110, 2002.
- Stolz Jr G. Numerical solutions to an inverse problem of heat conduction for simple shapes. *Journal of Heat Transfer*, 82(1):20–25, 1960.
- Su J. y Hewitt G.F. Inverse heat conduction problem of estimating time-varying heat transfer coefficient. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 45(8):777–789, 2004.
- Tanaka Y. y Kage H. Development and application of austempered spheroidal graphite cast iron. *Materials Transactions, JIM*, 33(6):543–557, 1992.

- Tikhonov A.N. y Arsenin V.Y. Solutions of ill-posed problems. *New York*, 1(30):487, 1977.
- Tourn B.A., Albanesi A.E., y Fachinotti V.D. Problema térmico inverso de conducción de calor aplicado al tratamiento térmico de austemperado usando optimización basada en simulaciones. En *XXIII Congreso de Métodos Numéricos y sus Aplicaciones (ENIEF)(La Plata, 7 al 10 de noviembre 2017)*. 2017.
- Tourn B.A., Álvarez Hostos J.C., y Fachinotti V.D. Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso quasi-Newton secuencial. En *XXXVIII Congreso argentino de mecánica computacional (MECOM)(Resistencia, Chaco, 1 al 5 de noviembre 2021)*. 2021a.
- Tourn B.A., Álvarez Hostos J.C., y Fachinotti V.D. Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear inverse heat conduction problems concerning the estimation of surface heat fluxes. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 125:105330, 2021b.
- Tourn B.A., Álvarez Hostos J.C., 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, 2021c.
- Unión Industrial Argentina (UIA). Debilidades y desafíos tecnológicos del sector productivo. 2008.
- 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.
- Vidyarthi G. y Singh K. Thin wall austempered ductile iron: a best replaceable material to steel and aluminum. *International Journal of Mechanical Engineering and Robotics Research*, 3(3):465, 2014.
- Vogel C.R. *Computational methods for inverse problems*, volumen 23. Siam, 2002.
- Voigt R.C. y Loper C.R. Austempered Ductile Iron - Process Control and Quality Assurance. *Journal of Heat Treating*, 1984.
- Wilk-Kolodziejczyk D., Regulski K., Giełtka T., Gumienny G., Jaśkowiec K., y Kluska-Nawarecka S. The selection of heat treatment parameters to obtain austempered ductile iron with the required impact strength. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 27(11):5865–5878, 2018.
- Wilk-Kolodziejczyk D., Regulski K., y Gumienny G. Comparative analysis of the properties of the nodular cast iron with carbides and the austempered ductile iron with use of the machine learning and the support vector machine. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 87(1):1077–1093, 2016.
- Xiong P., Deng J., Lu T., Lu Q., Liu Y., y Zhang Y. A sequential conjugate gradient method to estimate heat flux for nonlinear inverse heat conduction problem. *Annals of Nuclear Energy*, 149:107798, 2020.
- Yang C.Y., Chang L.C., Samani H., y Nakatsu R. Ameliorated austenite carbon content control in austempered ductile irons by support vector regression. *Mathematical Problems in Engineering*, 2013, 2013.
- Yescas M.A. Prediction of the Vickers hardness in austempered ductile irons using neural networks. *International Journal of Cast Metals Research*, 15(5):513–521, 2003.
- Yescas M.A., Bhadeshia H.K.D.H., y MacKay D.J. Estimation of the amount of retained austenite in austempered ductile irons using neural networks. *Materials Science and Engineering: A*, 311(1):162–173, 2001.

Zienkiewicz O.C., Taylor R.L., y Zhu J.Z. *The finite element method: its basis and fundamentals*. Elsevier, 2005.

Zou H. y Hastie T. Regularization and variable selection via the elastic net. *Journal of the royal statistical society: series B (statistical methodology)*, 67(2):301–320, 2005.

# Anexos

En este apartado se listan los principales artículos que contienen la totalidad del trabajo desarrollado en esta Tesis. La disposición elegida no responde a un criterio cronológico, pero tiene como fin ordenar primero los métodos e implementaciones propuestas, y luego presentar la aplicación desarrollada.

- Anexo A Tourn, B. A., Álvarez Hostos, J. C., & Fachinotti, V. D. (2021). 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.
- Anexo B Tourn, B. A., Álvarez Hostos, J. C., & Fachinotti, V. D. (2021). Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear inverse heat conduction problems concerning the estimation of surface heat fluxes. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 125, 105330.
- Anexo C Tourn, B. A., Álvarez Hostos, J. C., & Fachinotti, V. D. Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso cuasi-Newton secuencial. XXXVIII Congreso argentino de mecánica computacional (ME-COM)(Resistencia, Chaco, 1 al 5 de noviembre 2021).
- Anexo D Álvarez Hostos, J.C., Fachinotti, V.D., Peralta, I., & Tourn, B.A. (2019). Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime. *Numerical Heat Transfer, Part A*, 76(8), 648-663.

El tesista declara haber participado activamente en el desarrollo de los nuevos conceptos aportados y llevado a cabo los experimentos numéricos necesarios para alcanzar los resultados que se exponen. Estas tareas fueron realizadas bajo la dirección del Dr. Victor Fachinotti y del Dr. Ignacio Rintoul, y en conjunto con los co-autores de cada artículo.

Los abajo firmantes avalan esta declaración.

*Aval del Director de Tesis*

*Aval del Co-Director de Tesis*

---

Dr. Victor D. Fachinotti

---

Dr. Ignacio Rintoul



## **Anexo A**

# **A modified sequential gradient-based method for the inverse estimation of transient heat transfer coefficients in non-linear one-dimensional heat conduction problems**

El artículo presentado a continuación ha sido publicado en la revista “**International Communications in Heat and Mass Transfer**”:

B.A. Tourn, J.C. Álvarez Hostos, V.D.Fachinotti, “*A modified sequential gradient-based method for the inverse estimation of transient heat transfer coefficients in non-linear one-dimensional heat conduction problems*”.





# A modified sequential gradient-based method for the inverse estimation of transient heat transfer coefficients in non-linear one-dimensional heat conduction problems

B.A. Tourn<sup>a</sup>, J.C. Álvarez Hostos<sup>b</sup>, V.D. Fachinotti<sup>b1</sup>

<sup>a</sup>Centro de Investigación y Transferencia Rafaela (UNRaf-CONICET), CP2300 Santa Fe, Argentina

<sup>b</sup>CIMEC-UNL-CONICET, Predio Conicet “Dr Alberto Cassano”, CP 3000 Santa Fe, Argentina

Keywords: IHCP, BFGS, CGM, FEM, Heat transfer coefficient

## Abstract

In this communication, we introduce an online sequential implementation of a gradient-based method for reconstructing transient heat transfer coefficients in the context of non-linear one-dimensional heat conduction problems. Such a method employs a quasi-Newton updating strategy for computing the descent direction, in contrast with the traditional approach based on the conjugate gradient method. We denote the resulting procedure as the sequential quasi-Newton method (SQNM). The performance of the proposed algorithm was tested in the reconstruction of triangle-, sine-, and square-wave functions that models different transient heat transfer coefficients and compared with the results obtained using a standard sequential function specification method. The SQNM was capable of properly reconstruct the aforementioned exact functions independently of the location of the temperature sensors within the body. The proposed strategy is fast, robust, and reliable, which demonstrates the suitability of employing the sequential gradient-based implementation, together with the quasi-Newton updating strategy, for reconstructing transient heat transfer coefficients in the context of one- and two-dimensional non-linear heat conduction problems. Thus, the

---

<sup>1</sup>Corresponding author. E-mail address: vfachinotti@cimec.unl.edu.ar (V.D. Fachinotti).

proposed method is a novel alternative strategy to other online inverse estimation procedures.

## 1. Introduction

The inverse heat conduction problems (IHCP) are conceived as a sub-category within the field of heat transfer analysis. Finding a solution to this kind of problems is a difficult task due to their ill-posed nature (Ozisik, 2000; Beck et al., 1985; Alifanov, 1994). The strategy to overcome the undesired effects concerning the solution of an inverse problem is called regularization (Ozisik, 2000; Mueller y Siltanen, 2012). It modifies the original ill-posed problem in order to convert it into a conditionally well-posed one where the instabilities can be eliminated or, at least, drastically diminished. Among the vast range of IHCP study cases (Ozisik, 2000), the estimation/reconstruction of heat transfer coefficients (HTC) concerning conduction heat transfer processes with convective boundary conditions is of great interest since it holds meaningful information involved in many heating and/or cooling applications. Some of the applied heat transfer problems involving the estimation of HTC include quenching (Farahani y Kowsary, 2017; Sagheby y Kowsary, 2009; Osman y Beck, 1990) and heat treatment of metals (Joachimiak et al., 2019; Skubisz y Adrian, 2018) or the heat transfer phenomena in industrial process equipment (Bozzoli et al., 2014; Chen et al., 2018).

The computational approach is the most common way to deal with the different kinds of IHCP because of the limitations in the availability of analytical solutions as well as its practical use in real applications (Beck et al., 1985). The methods that can be used in this context can be classified into two main groups: *whole domain* and *sequential* methods (Beck et al., 1985). In the former, the solution algorithm estimates the unknown quantity of interest simultaneously for all instants within the whole time domain of a transient analysis. One of the most popular solution strategies belonging to such category is the iterative conjugate gradient method (CGM) coupled to the auxiliary sensitivity and adjoint problems (Ozisik, 2000; Alifanov, 1994; Jarny et al., 1991). Such an implementation is a powerful methodology for solving both linear and non-linear problems. It circumvents the extremely time-consuming task of computing the sensitivity at each step of the iterative process. The “viscous” feature of the iterative algorithm (Alifanov, 1994; Dowding y Beck, 1999) is responsible for its built-in regularization capability (Alifanov, 1994). Razzaghi et al. (2019) implemented a whole domain CGM with sensitivity and adjoint problems obtaining a satisfactory reconstruction of a spatially and temporally varying HTC acting at the surface of a hot plate with constant thermo-physical properties. Su y Hewitt (2004) accurately reconstructed different transient HTC of forced-convective flow boiling over the outer surface of a tube by implementing a whole domain CGM with sensitivity and adjoint problems in the context of a linear, one-dimensional axisymmetric formulation for the heat transfer problem. In (Helmig et al., 2020), the authors investigate the influence of sensor count and spacing over the reconstruction quality of HTC acting in two test cases, namely a metal cutting process and a problem of thermal management in power electronics. Colaco y Orlande (1999) coupled the CGM to the sensitivity and adjoint problems in order to estimate the space- and time-varying HTC acting at a surface of a plate considering temperature-dependent thermo-physical properties, and compared the solutions obtained through different formulas of the conjugation coefficient.

On the other hand, sequential methods estimate the unknown quantities step by step in time. Such tech-

niques can be used simultaneously with the data acquisition in an actual experiment, so they estimate the unknown quantity of interest in a real- or nearly real-time manner. The most widely employed sequential method is Beck's sequential function specification method (SFSM) (Beck et al., 1985), which was originally designed to find the surface heat flux from temperature measurements recorded within a heat transfer domain in a sequential manner. Beck et al. (1985) introduced the concept of *future time steps* in order to achieve this goal. Such a strategy involves the definition of two main concepts: a prescribed number of few temperature readings ahead of the current instant of time, along with the specification of the functional form that the unknown heat flux needs to have during the temporarily assumed reduced time interval. The use of future time readings is understood as a regularization strategy since it leads to a stabilization of the inversion procedure (Lamm, 1995). For the case of the estimation of transient HTC acting at the surface of a body, a specific sequential method was conceived (Beck et al., 1985; Beck y Osman, 1989; Osman y Beck, 1990). The algorithms proposed in those works differ from the SFSM for surface heat flux estimation since the sensitivity coefficients depend on the unknown quantity of interest, which leads to a formulation involving a nonlinear system of equations. The Gauss-Newton linearization strategy is employed to find a solution to such a system.

Within the category of sequential inverse estimation algorithms, there is another strategy that combines the best features from the already mentioned CGM coupled to the sensitivity and adjoint problem and the SFSM. The so-called sequential conjugate gradient method (SCGM) (Dowding y Beck, 1999) is essentially a sequential performing of the CGM implemented for a reduced interval associated with the time extent defined by the concept of future time steps. The mathematical formulation supporting the use of this method for a non-characteristic Cauchy problem is addressed by Reinhardt y Hào (1996). Among the main benefits of the SCGM, Dowding y Beck (1999) mention that such a technique does not require a prescribed functional form as in the traditional SFSM, whereby it may be adequate in addressing non-linear heat transfer problems.

The main issue addressed in the reviewed communications is the reconstruction of transient surface heat fluxes. However, the current literature review has revealed that the SCGM has not yet been used to estimate or reconstruct a transient HTC at the surface of a body whose physical properties are temperature-dependent. Xiong et al. (2020) successfully reconstructed both a square- and a sine-wave surface heat flux functions acting on a body with thermo-dependent physical properties, at the same time that the influence of the number of future time steps to stabilize the reconstructions in the presence of different noise levels is investigated. Dowding y Beck (1999) employed the SCGM to reconstruct an exact surface heat flux function which is triangular on space and undergoes a step on time, acting on a two-dimensional body with spatially-dependent thermo-physical properties. Kim et al. (2002) implemented the SCGM to reconstruct the surface heat flux acting at the upper plate of a laminar-forced convective flow between two parallel plates, by using temperature measurements on the lower plate. The formulation addressed the non-linearity of the problem since the fluid properties are temperature-dependent. In (Kim et al., 2003a), the authors reconstructed a time- and space-varying heat flux acting on the surface of a three-dimensional slab with temperature-dependent properties.

The present communication focuses on implementing a sequential gradient-based method for recons-

tracting transient HTC in the context of non-linear heat conduction problems, where the non-linearity is a consequence of the temperature-dependent behavior of both conductivity and volumetric heat capacity. However, we propose a slight modification: instead of implementing the sequential version of the CGM, i.e. the SCGM, we employ a quasi-Newton (QN) updating strategy to compute the direction of descent. We denote the resulting method as the SQNM. The implementation of a QN updating strategy in the context of whole domain IHCP cases was already studied in previous communications (Molavi et al., 2013; Rahmani et al., 2010; Ngo et al., 2017; Rezapour et al., 2013; Ngo et al., 2015, 2016). Accordingly, this is actually the first study focused on using a sequential gradient-based technique to reconstruct a transient HTC acting on the surface of a body exhibiting temperature-dependent properties. Implementing such a procedure for estimating the HTC in the framework of non-linear heat transfer problems is a feature much closer to real applications such as the analysis of heating and/or cooling/quenching processes.

The remainder of this article is structured as follows: section 2 is devoted to the formulation of the inverse, non-linear one-dimensional problem and its computational solution procedure; section 3 is dedicated to the formulation of the sequential implementation of the QN strategy, together with the sensitivity and adjoint problems, for the reconstruction of transient HTC; in section 4, a few numerical experiments are proposed together with the obtained main results; the discussion of such results is presented in section 5; a two-dimensional extension involving both multiple sensors and unknowns is introduced in section 5.2; and finally, the conclusions are drawn in section 6.

## 2. Formulation of the inverse problem

### 2.1. Governing equations

Let us consider an infinitely long plate of thickness  $L$ . One surface of the plate is isolated, whereas the other surface is exposed to a Robin condition given by an environment temperature  $T_\infty$  and an unknown transient HTC  $h(t)$ . The volumetric heat capacity  $\rho c(T)$  and the thermal conductivity  $k(T)$  of the body are temperature-dependent, which introduces a non-linearity in the heat transfer problem. The main features of the problem geometry are depicted in Fig. A.1. The temperature of the plate at the beginning of the transient analysis is  $T_0(x)$ , and its geometry features allow the solution of the thermal problem under a one-dimensional model. The corresponding initial and boundary value problem (IBVP) (B.1) establishing a relationship between the temperature field throughout the body and the recently described features is given by the transient heat conduction equation (B.1a) without internal heat sources, the Robin condition at the bottom surface (A.1b), the Neumann condition at the top surface (B.1d), and the initial condition (B.1b),

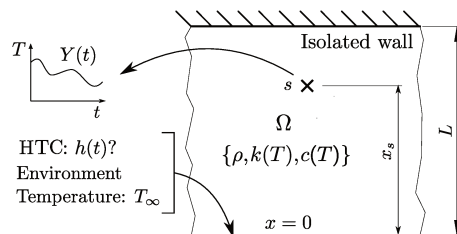
$$\rho c(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right), \quad 0 < x < L, \quad t_0 < t \leq t_f \quad (\text{A.1a})$$

$$k(T) \frac{\partial T(0, t)}{\partial x} = h(t)[T(0, t) - T_\infty], \quad (h(t) \text{ unknown}), \quad x = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \quad (\text{A.1b})$$

$$-\frac{\partial T(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, \quad t_0 < t \leq t_f, \quad (\text{A.1c})$$

$$T(x, 0) = T_0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t = 0, \quad (\text{A.1d})$$

where  $T(x, t)$  is the temperature at position  $x$  and time  $t$ . This set of equations yields an incompletely posed IBVP, since the Robin condition is undetermined. The aforementioned issue can be overcome based on the availability of some additional information such as the temperature-time history  $Y(t)$  at a sensor point  $s$  placed at certain position  $x_s$  within the body  $\Omega$ .



**Figura A.1:** Domain and boundary conditions of the IHCP.

Accordingly, the IHCP to be addressed in this communication consists in finding a time-dependent function  $h(t)$  at  $x = 0$  such that the temperature  $T(x, t)$  computed by the inverse model at the sensor location match in the best possible way the provided temperature-time history  $Y(t)$ , i.e.  $T(x_s, t; h(t)) - Y(t) \approx 0$  for  $t \geq 0$ . This outcome is monitored by defining an appropriate error measurement and a stopping criterion, which are concepts that will be discussed later in this communication. The problem of estimating the unknown function  $h(t)$  using the information of the available temperature-time history  $Y(t)$  within the body is ill-posed (Beck et al., 1985; Ozisik, 2000; Alifanov, 1994), which is actually a feature related to the extreme sensitivity of the estimated values to errors in the input data.

Summarizing, the continuous IHCP problem of computing the time-dependent HTC is defined by the IBVP given by the set of equations (B.1) together with the temperature data measurements  $Y(t)$  and the condition  $T(x_s, t; h(t)) - Y(t) \approx 0$ . In this communication, the finite element method (FEM) is employed to find a numerical solution for such a problem.

## 2.2. Finite element-based solution of the inverse problem

The FEM-based solution of the transient heat conduction problem will be conducted under the standard Bubnov-Galerkin weak-form of the governing equations, with the domain discretized in  $N$  linear elements. The nodes are equally spaced, whereby all the elements have the same length  $\Delta x$ .

The temperature field in  $\Omega$  is approximated as  $T(x, t) = \mathbf{N}(x) \cdot \mathbf{T}(t)$  for all  $x \in \Omega$ , where  $\mathbf{N}(x)$  is the vector of shape functions associated to every node of the finite elements mesh and  $\mathbf{T}(t)$  is the vector of nodal temperatures (unknown). Using a constant time step and fully implicit backward Euler time-integration scheme, after some mathematical manipulations, the set of equations (B.1)

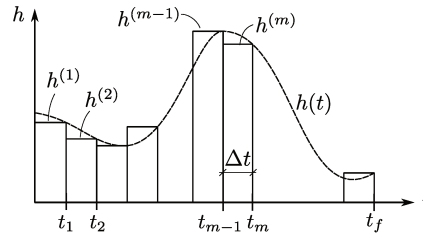
takes the form of the nonlinear algebraic system

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

where  $(*)^{(m)}$  is  $(*)$  at time  $t_m \equiv t = m\Delta t$ ,  $m = 1, 2, \dots, M$  (being  $M$  the total number of time steps),  $\Delta t$  is the uniform time step,  $\mathbf{C}^{(m)} \equiv \mathbf{C}(\mathbf{T}^{(m)})$  is the capacitance matrix,  $\mathbf{K}^{(m)} \equiv \mathbf{K}(\mathbf{T}^{(m)})$  is the conductivity matrix, and  $\mathbf{Q}^{(m)} \equiv \mathbf{Q}(\mathbf{T}^{(m)})$  is the thermal loads vector, given by

$$\begin{aligned} \mathbf{C}^{(m)} &= \int_0^L \rho c^{(m)} \mathbf{N}^T \mathbf{N} dx, \\ \mathbf{K}^{(m)} &= \int_0^L k^{(m)} \nabla \mathbf{N}^T \nabla \mathbf{N} dx + h^{(m)} [\mathbf{N}(0)]^T \mathbf{N}(0), \\ \mathbf{Q}^{(m)} &= h^{(m)} T_\infty [\mathbf{N}(0)]^T. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

At the first time step ( $m = 1$ ), the nodal temperature vector  $\mathbf{T}^0$  is given by the initial condition. The recently described numerical analysis involves a piecewise approximation of the unknown  $h(t)$  in time, which is performed via a discretization of the time domain in  $M$  uniform time steps as depicted in Fig. A.2.



**Figure A.2:** Discretization of the transient HTC function.

The transient temperature field throughout the body is obtained sequentially at every time step. At the time instant  $m\Delta t$ , the nonlinear equation (B.2) is solved using the Newton-Raphson iterative scheme: knowing the temperature  $\mathbf{T}_j^{(m)}$  for the iteration  $j = 0, 1, 2, \dots$  (with  $\mathbf{T}_0^{(m)} = \mathbf{T}^{(m-1)}$ ), that for iteration  $j + 1$  is computed as  $\mathbf{T}_{j+1}^{(m)} = \mathbf{T}_j^{(m)} + \Delta \mathbf{T}_j^{(m)}$ , where  $\Delta \mathbf{T}_j^{(m)}$  is the solution of the linear system

$$\mathbf{R}(\mathbf{T}_j^{(m)}) + \frac{\partial \mathbf{R}(\mathbf{T}_j^{(m)})}{\partial \mathbf{T}_j^{(m)}} \Delta \mathbf{T}_j^{(m)} = \mathbf{0}. \quad (\text{A.4})$$

The process ends at the iteration  $j$  for which the norm of  $\mathbf{R}(\mathbf{T}_j^{(m)})$  is smaller than a user-defined tolerance; then, we adopt  $\mathbf{T}^{(m)} \equiv \mathbf{T}_j^{(m)}$  and move to the following time instant  $(m+1)\Delta t$ .

### 3. Sequential quasi-Newton method

As described before, the sequential quasi-Newton method (SQNM) is based on the sequential conjugate gradient method (SCGM) with auxiliary sensitivity and adjoint problems. Both methods resort to these auxiliary formulations to avoid the expensive computation of the sensitivity of the temperature to the HTC at each time step. Further details concerning the derivation of the non-linear CGM method are given by Alifanov (1994) and Jarny et al. (1991). From now on, we assume that the unknown function  $h(t)$  belongs to the Hilbert space of square-integrable functions  $L_2(t_0, t_f)$  in the time domain  $t_0 \leq t \leq t_f$ .

#### 3.1. Objective function

The solution of the inverse problem requires the adoption of an objective function, which is usually defined through a least-squares criterion (Ozisik, 2000; Alifanov, 1994; Cao y Lesnic, 2018; Azimi et al., 2012) as

$$S[h(t)] = \int_{t_0}^{t_f} [T(x_s, t; h(t)) - Y(t)]^2 dt = \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L [T(x, t; h(t)) - Y(t)]^2 \delta(x - x_s) dx dt, \quad (\text{A.5})$$

where  $\delta(x)$  is the Dirac delta function.

#### 3.2. The sensitivity problem

The sensitivity function  $\Delta T(x, t)$  is the directional derivative of  $T(x, t)$  in the direction of the perturbation of the unknown function (Ozisik, 2000; Jarny et al., 1991). First, a perturbed problem is obtained by replacing  $T(x, t)$  and  $h(t)$  in the problem (B.1) by the perturbed quantities  $T(x, t) + \Delta T(x, t)$  and  $h(t) + \Delta h(t)$ , where  $\Delta h(t)$  is also a function that belongs to the Hilbert space  $L_2(t_0, t_f)$ . Then, the difference between the perturbed and the original problem defines the so-called sensitivity problem:

$$\rho c(T) \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left( k(T) \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial x} \right), \quad 0 < x < L, t_0 < t \leq t_f \quad (\text{A.6a})$$

$$k(T) \frac{\partial \Delta T(0, t)}{\partial x} = h(t) \Delta T(0, t) + \Delta h(t) [T(0, t) + \Delta T(0, t) - T_\infty], \quad x = 0, t_0 < t \leq t_f \quad (\text{A.6b})$$

$$-\frac{\partial \Delta T(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, t_0 < t \leq t_f \quad (\text{A.6c})$$

$$\Delta T(x, 0) = 0, \quad 0 \leq x \leq L, t = 0. \quad (\text{A.6d})$$

### 3.3. The adjoint problem

In the adjoint problem, the objective function (A.5) is replaced by the augmented objective function (Ozisik, 2000; Alifanov, 1994; Colaco y Orlande, 1999; Azimi et al., 2012)

$$\begin{aligned} \tilde{S}[h(t)] = & \int_0^{t_f} \int_0^L [T(x, t; h(t)) - Y(t)]^2 \delta(x - x_s) dx dt + \dots \\ & \dots + \int_0^{t_f} \int_0^L \lambda(x, t) \left\{ \rho c(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( k(T) \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} \right) \right\} dx dt. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

where  $\lambda(x, t)$  is a Lagrange multiplier. Note that the term between braces in the second integral is null in virtue of equation (B.1a).

An expression for the variation  $\Delta \tilde{S}[h(t)]$  of the functional  $\tilde{S}[h(t)]$  can be developed considering that  $T(x, t)$  is perturbed by  $\Delta T(x, t)$  when  $h(t)$  is perturbed by  $\Delta h(t)$ . The variation  $\Delta \tilde{S}[h(t)]$  is defined as the directional derivative of the functional  $\tilde{S}[h(t)]$  in the direction of the perturbation  $\Delta h(t)$ . First, we need to rewrite the previous equation by replacing  $T(x, t)$  and  $h(t)$  by the perturbed quantities  $T(x, t) + \Delta T(x, t)$  and  $h(t) + \Delta h(t)$ , respectively. Thus,  $\tilde{S}[h(t)]$  is actually replaced by  $\tilde{S}[h(t)] + \Delta \tilde{S}[h(t)]$ . After subtracting equation (A.7) from the previously defined perturbed equations, and neglecting the second order terms (as customary Ozisik (2000)), the expression for the perturbed augmented objective functional can be written as

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{S}[h(t)] = & \int_0^{t_f} \int_0^L 2[T(x, t; h(t)) - Y(t)] \Delta T(x, t) \delta(x - x_s) dx dt + \dots \\ & \dots + \int_0^{t_f} \int_0^L \lambda(x, t) \left\{ \rho c(T) \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left( k(T) \frac{\partial \Delta T(x, t)}{\partial x} \right) \right\} dx dt. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Using integration by parts on the second integral together with the boundary and initial conditions of the sensitivity problem (A.6),  $\Delta \tilde{S}[h(t)]$  can be expressed as

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{S}[h(t)] = & \int_0^{t_f} \int_0^L \left\{ 2[T(x, t; h(t)) - Y(t)] \delta(x - x_s) - \rho c(T) \frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} - k(T) \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} \right\} \Delta T(x, t) dx dt + \dots \\ & \dots + \int_0^L \rho c(T) \lambda(x, t_f) \Delta T(x, t_f) dx + \int_{t_0}^{t_f} \lambda(0, t) h(t) \Delta T(0, t) dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \lambda(L, t)}{\partial x} k(T) \Delta T(L, t) dt - \int_{t_0}^{t_f} \frac{\partial \lambda(0, t)}{\partial x} k(T) \Delta T(0, t) dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \lambda(0, t) \Delta h(t) [T(0, t) + \Delta T(0, t) - T_\infty] dt. \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

This is the weak formulation of the auxiliary adjoint problem, whose corresponding strong



formulation is given by the following IBVP:

$$\rho c(T) \frac{\partial \lambda(x, t)}{\partial t} + k(T) \frac{\partial^2 \lambda(x, t)}{\partial x^2} = 2[T(x, t; h(t)) - Y(t)] \delta(x - x_s), \quad 0 < x < L, t_0 \leq t < t_f \quad (\text{A.10a})$$

$$k(T) \frac{\partial \lambda(0, t)}{\partial x} = \lambda(0, t) h(t), \quad x = 0, t_0 \leq t < t_f \quad (\text{A.10b})$$

$$\frac{\partial \lambda(L, t)}{\partial x} = 0, \quad x = L, t_0 \leq t < t_f \quad (\text{A.10c})$$

$$\lambda(x, t_f) = 0, \quad 0 \leq x \leq L, t = t_f. \quad (\text{A.10d})$$

Both the sensitivity and the adjoint problems are mathematically equivalent to the original IHCP given by (B.1), whereby their solution can be found under the same numerical framework. That is to say, all three thermal, adjoint, and sensitivity problems are solved via the FEM. The only difference is that the equation (A.10d) of the adjoint problem is a final condition instead of an initial one. Therefore, this problem must be solved backward in time, starting from  $t_f$  until  $t_0$  is reached.

### 3.4. The gradient equation

The expression for the gradient of the augmented functional  $\tilde{S}$  is obtained by letting vanish the terms containing  $\Delta T(x, t)$  in equation (A.9) (Ozisik, 2000; Colaco y Orlande, 1999; Su y Hewitt, 2004), leading to

$$\Delta \tilde{S}[h(t)] = \int_{t_0}^{t_f} \lambda(0, t) [T(0, t) - T_\infty] \Delta h(t) dt.$$

On the other hand, based on the hypothesis that the unknown function  $h(t)$  belongs to the space of square integrable functions in the domain  $0 \leq t \leq t_f$ , the expression of the increment  $\Delta \tilde{S}[h(t)]$  (Ozisik, 2000; Colaco y Orlande, 1999; Su y Hewitt, 2004) is

$$\Delta \tilde{S}[h(t)] = \int_{t_0}^{t_f} \nabla \tilde{S}[h(t)] \Delta h(t) dt.$$

After comparing these last two expressions, the equation for computing the gradient can be stated (Ozisik, 2000; Colaco y Orlande, 1999; Su y Hewitt, 2004) as

$$\nabla \tilde{S}[h(t)] = \lambda(0, t) [T(0, t) - T_\infty]. \quad (\text{A.11})$$

### 3.5. The iterative procedure

The unknown function  $h(t)$  is estimated through the minimization of the functional  $S[h(t)]$ . Such computation is achieved by means of an iterative procedure, which involves a proper selec-

tion of both the direction of descent and the step size in going from iteration  $k$  to  $k + 1$ ,

$$h_{k+1}(t) = h_k(t) + \beta_k d_k(t), \quad (\text{A.12})$$

where  $\beta_k$  is the search step size and  $d_k(t)$  is the direction of descent. Under the classical formulation of the non-linear CGM, the latter is computed as  $d_{k+1}(t) = -\nabla S[h_{k+1}(t)] + \gamma_{k+1} d_k(t)$ , where  $\gamma_k$  is the conjugation coefficient that can be obtained by several formulas (Hager y Zhang, 2006), such as those of Polak-Ribiere and Fletcher-Reeves (Ozisik, 2000; Nocedal y Wright, 2006). In this communication, the computation of the direction of descent is performed instead via the BFGS quasi-Newton iterative scheme.

**The BFGS formulation.** The direction of descent in a quasi-Newton iterative scheme is computed as

$$d_{k+1}(t) = -B_{k+1} \nabla S_{k+1}, \quad (\text{A.13})$$

where  $B_{k+1}$  is a matrix that approximates the Hessian  $\nabla^2 S_{k+1}$ , which is updated at every iteration using a low-rank formula. Such a matrix is chosen to satisfy the secant equation (Molavi et al., 2013; Nocedal y Wright, 2006)  $(B_{k+1})^{-1} s_k = y_k$ , being  $y_k = \nabla S_k - \nabla S_{k-1}$  and  $s_k = \beta_k d_k$ . For instance, the Broydon-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) formulation defines the approximate matrix as (Molavi et al., 2013)  $B_{k+1} = (I - s_k y_k^T / \Psi_k) B_k (I - y_k s_k^T / \Psi_k) + s_k s_k^T / \Psi_k$ , being  $\Psi_k = y_k^T s_k$  and  $I$  the identity matrix. The convergence rate of a quasi-Newton method like this is less than second-order (Nocedal y Wright, 2006).

**The computation of the step size  $\beta_k$ .** The step size  $\beta_k$  is computed by minimizing the original objective function  $S[h_{k+1}(t)]$  with respect to  $\beta_k$ . The mathematical operation concerned in such procedure can be written (Ozisik, 2000) as

$$\beta_k = \arg \min_{\beta_k} S[h_{k+1}(t)] = \arg \min_{\beta_k} \int_{t_0}^{t_f} [T(x_s, y; h_k(t) + \beta_k d_k(t)) - Y(t)]^2 dt.$$

The expression  $T(x_s, t; h_k(t) + \beta_k d_k(t))$  is transformed into  $T(x_s, t; h_k(t)) - \beta_k \Delta T(x_s, t; d_k(t))$  via a first-order Taylor series expansion, being  $\Delta T(x_s, t; d_k(t))$  the solution to the sensitivity problem (A.6) by making  $\Delta h_k(t) = d_k(t)$ . The optimal value of  $\beta_k$  is encountered by computing the derivative of the recently defined integral expression with respect to  $\beta_k$  and setting the resulting expression to zero, which after some manipulation leads to

$$\beta_k = \frac{\int_{t_0}^{t_f} \{T(x_s, t, h_k(t)) - Y(t)\} \Delta T(x_s, t, d_k(t)) dt}{\int_{t_0}^{t_f} [\Delta T(x_s, t, d_k(t))]^2 dt}. \quad (\text{A.14})$$

Such computation is actually an exact line-search strategy, since the employment of the Taylor expansion of the temperature field at the sensor location in terms of the perturbed quantity  $\Delta h_k(t) = d_k(t)$  allows an explicit derivation of the step size. Inexact line-search strategies (Nocedal y Wright, 2006) are not discussed in this work.

### 3.6. The sequential implementation

So far, the already described methodology corresponds to a whole domain gradient-based method with sensitivity and adjoint problems intended to find the unknown function  $h(t)$ . To accomplish such a task, the time domain  $t_0 \leq t \leq t_f$  is split into  $M$  equally spaced sub-intervals  $\Delta t$ , and the temperature measurements must be available at each time instant  $t = m\Delta t \equiv t_m$  ( $m = 0, 1, 2, \dots, M$ ). However, sequential implementation of such gradient-based methods is possible through the definition of a positive integer parameter  $r \ll M$  (Kim et al., 2002; Dowding y Beck, 1999), which coincides with the future time steps concept defined in Beck's method. Suppose that the latter methodology is used to compute the current value of  $h(t)$  at time instant  $t = t_m$ , the function  $h(t)$  is considered to be already estimated up to the time instant  $t_{m-1}$ . Hence, a transitory assumption is made where  $t_0 \equiv t_m$  and  $t_f \equiv t_{m+r-1}$  where  $t_{m+r-1} = t_m + r\Delta t$ , so the time domain in this sequence is  $t_m \leq t \leq t_{m+r-1}$ . In this shorter time interval, the gradient-based method estimates the function  $h(t)$  identically as in the whole domain version. However, the method retains only the estimation that belongs to the first time step of the defined sequence. The procedure continues by shifting the time interval one time step after each sequential estimation. In other words, the sequential implementation reduces sequentially and consecutively the dimension of the original whole domain problem by defining a shorter time interval in each sequence whose length is characterized by  $r$ . The aforementioned explanation demonstrates that the sequential implementation of such a gradient-based method is identical to its whole domain version, except for the time domain in which they are applied.

### 3.7. The stopping criterion

A method commonly used to ensure an adequate stopping of the iterative procedure is the so-called discrepancy principle (Ozisik, 2000; Alifanov, 1994), which is written as  $S[h_k(t)] < \epsilon$ . The value  $\epsilon$  can be chosen to be sufficiently small in the cases of error-free input data, whereas in the presence of noisy data, it is computed as  $\epsilon = \sigma^2 t_f$ . The latter expression is valid when the standard deviation  $\sigma$  of the noisy data is available (as it is the case in this communication), which ensures a sufficiently accurate solution that accomplishes  $|T(x_s, t; h_k(t)) - Y(t)| \approx \sigma$ . Nevertheless, the aforementioned criterion may not be fulfilled specially for large  $r$  (Kim et al., 2003b). In such a

case, the following conventional criterion can be employed:

$$|S[h_{k+1}(t)] - S[h_k(t)]| < \epsilon. \quad (\text{A.15})$$

### 3.8. The solution algorithm

This section is focused on explaining the procedure of the sequential gradient-based method with the sensitivity and adjoint problems with a QN updating, which is applied in each sequence of the sequential implementation. It is assumed that the HTC is known up to time  $t_{m-1}$ , and that its discrete values are stored in the vector  $\mathbf{h} = [h^{(1)}, h^{(2)}, \dots, h^{(m-1)}]^T$ . The procedure is the following:

1. Select the number of future time steps  $r$ .
2. Define the current sequence given by the time interval  $t \in [t_m, t_{m+r-1}]$ , which corresponds to the transitory assumption  $t_0 \equiv t_m$  and  $t_f \equiv t_{m+r-1}$ . Then, build the input data vector  $\mathbf{Y}^r = [Y^{(m)}, Y^{(m+1)}, \dots, Y^{(m+r-1)}]^T$  containing the measurements recorded during the temporary assumed time domain.
3. Set  $k = 0$  and propose an initial guess for the unknown HTC, which can be written as  $\mathbf{h}_k^r = [h_k^{(m)}, h_k^{(m+1)}, \dots, h_k^{(m+r-1)}]^T$ .
4. Compute the temperature  $\mathbf{T}_k^r = [T_k^{(m)}, T_k^{(m+1)}, \dots, T_k^{(m+r-1)}]^T$  at the sensor location  $x_s$ . To do so, solve the FEM equation (B.2) with the estimated value  $\mathbf{h}_k^r$  as it was a direct problem.
5. Compute the objective function  $S(\mathbf{h}_k^r)$  from equation (A.5) using  $\mathbf{T}_k^r$  from step 4 and  $\mathbf{Y}^r$  from step 2, and check the stopping criterion (A.15). If it is met, stop the iterative process and go to step 11; if not, continue and go to the following step.
6. Solve the adjoint problem (A.10) by the FEM using  $\mathbf{h}_k^r$ , to obtain  $\lambda^r$  at  $x = 0$ . Then, compute the gradient  $\nabla S(\mathbf{h}_k^r)$  with equation (A.11).
7. Compute the direction of descent  $\mathbf{d}_k^r$  from equation (A.13) using the BFGS computation procedure.
8. Set  $\Delta \mathbf{h}_k^r = \mathbf{d}_k^r$  and solve the sensitivity problem (A.6) by the FEM to obtain  $\Delta \mathbf{T}_k^r$  at the sensor location  $x_s$ .
9. Compute the search step size  $\beta_k$  from equation (A.14) using the previously computed quantities  $\mathbf{T}_k^r$  and  $\Delta \mathbf{T}_k^r$ .
10. Compute a new estimate  $\mathbf{h}_{k+1}^r$  by using the updating formula (A.12), set  $k = k + 1$ , and go back to the step 4.
11. Once the stopping criterion (A.15) is met, retain only the first component of the converged value,  $h_k^{(m)} = \mathbf{h}_{\text{conv}}^r(1)$ , and attach it at the end of solution vector containing the converged

values up to the time instant  $t = t_{m-1}$  leading to  $\mathbf{h} = [h^{(1)}, h^{(2)}, \dots, h^{(m-1)}, h^{(m)}]^T$ . Shift the time step by one by making  $t_m \equiv t_m + \Delta t$  and go back to step 2.

12. Continue the iterative process until  $m + r - 1 = M$ .

A relevant detail suggested by Beck y Osman (1989) is that the sequential implementation allows a temporary linearization of the non-linear heat transfer problem. The temperature-dependent thermo-physical properties can be assumed as constant during each sequential interval ( $r$ -future time steps), whereby the solution to the direct problem in step 4 can be obtained using a linear solver. This is a valid approximation since the duration of the sequence is much lower than the duration of the whole experiment, so the variation of the thermo-physical properties can be considered as negligible, albeit it depends on the grade of non-linearity of the problem. This approach turns the originally non-linear direct problem into a linear one at every sequence, considerably reducing the computational time. The temperature value used for the computation of the transitory assumed constant thermo-physical properties is the one from the previous time step  $t = t_{m-1}$ , therefore  $k^{(m)} \equiv k(T^{(m-1)})$  and  $\rho c^{(m)} \equiv \rho c(T^{(m)})$ . Finally, it is worth mentioning that the time integral expressions involved in the current analysis are computed by the trapezoidal rule.

## 4. Numerical examples and results

The current section is focused on assessing the performance achieved under the sequential implementation of the gradient-based method, which has been described in the previous section. For this purpose, the proposed procedure will be used in some numerical examples concerning the reconstruction of transient HTC. An infinitely long 1008 steel plate is considered similar to that described in Section 2. The density of 1008 steel is  $\rho = 7850 \text{ kg/m}^3$ , whereas its thermal conductivity and heat capacity are given in Table A.1 for different values of temperature (Handbook, 2005).

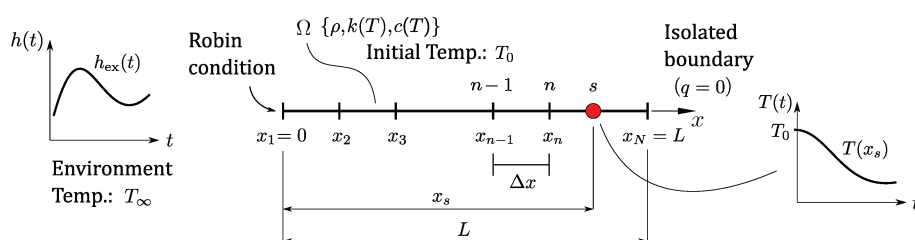
**Table A.1:** Thermo-physical properties of 1008 steel according to Handbook (2005)

Temperature [K]	100	200	300	400	500	600	700	800	900
<b>Thermal conductivity</b> [W/(m · K)]	57.8	53.2	49.4	45.6	41.0	36.8	33.1	28.5	27.9
<b>Heat capacity</b> [J/(kg · K)]	481	519	553	595	662	754	867	875	846

The thickness of the plate is  $L = 0.01 \text{ m}$ . The surface of the plate at  $x = L$  is isolated, whereas that at  $x = 0$  is exposed to an environment temperature of  $T_\infty = 500^\circ\text{C}$  and a prescribed transient HTC. The sensor  $s$  is located at the isolated surface, i.e.  $x_s = L$ . The initial temperature is  $T_0 = 900^\circ\text{C}$ , being homogeneous throughout the body. The duration of the transient analysis will be  $t_f = 10 \text{ s}$ . Three test cases are considered, differing in the exact HTC function  $h_{\text{ex}}(t)$  to be reproduced: A) triangular wave; B) sine wave; C) square wave. In all three cases, the minimum

and maximum values of such a parameter is  $h_{\min} = 1.0 \times 10^4 \text{ W}/(\text{°C} \cdot \text{m}^2)$  and  $h_{\max} = 2.0 \times 10^4 \text{ W}/(\text{°C} \cdot \text{m}^2)$ , respectively.

Using the aforementioned set up, the direct heat conduction problem is computed numerically by the FEM. Figure A.3 depicts the computational one-dimensional model, which includes the main features of the problem and the geometry. In this sense, the sensor (denoted with a red dot) is placed at a generic  $x_s$  position from the left boundary. The time domain  $[0, t_f]$  is divided into  $M_d = 200$  partitions, being  $M_d$  the number of time steps in the whole domain, direct run. From the output of this model, the temperature history at the sensor location is recovered and stored in the measurement vector  $\mathbf{Y}$ . To mimic the unavoidable errors involved in an actual experiment, the data is perturbed introducing white noise as  $\mathbf{Y} \equiv \mathbf{Y} + \omega \cdot \mathbf{R}$ , where  $\omega$  is the noise level and  $\mathbf{R}$  is a vector of  $M_d$  normally distributed pseudo-random numbers having zero mean and unitary variance. Two noise levels will be addressed,  $\omega = 0.02$  and  $\omega = 0.05$ . Then, the SQNM is used to reconstruct the transient HTC starting from the input data  $\mathbf{Y}$ . A few values of the parameter  $r$  will be investigated. Although the time domain is the same as in the direct run ( $[0, t_f]$ ), the partition employed in the inverse analysis will be  $M < M_d$ , since it is necessary to enforce the stability of the sequential algorithm (Beck et al., 1985; Keanini et al., 2005). The performance of the inverse computations is evaluated through an appropriate error measurement between the estimated and the exact HTC,  $h_{\text{est}}$  and  $h_{\text{ex}}$  respectively. The root mean square error RMSE =  $\{(1/M) \sum_{m=1}^M [h_{\text{ex}}(t_m) - h_{\text{est}}(t_m)]^2\}^{1/2}$  is adopted for such a purpose. The proposed method is implemented within an Octave environment, in a personal computer with an AMD A12-9720P RADEON R7, 2.70 GHz, 12 cores processor, 16.0 GB of RAM memory, and a x64 OS.

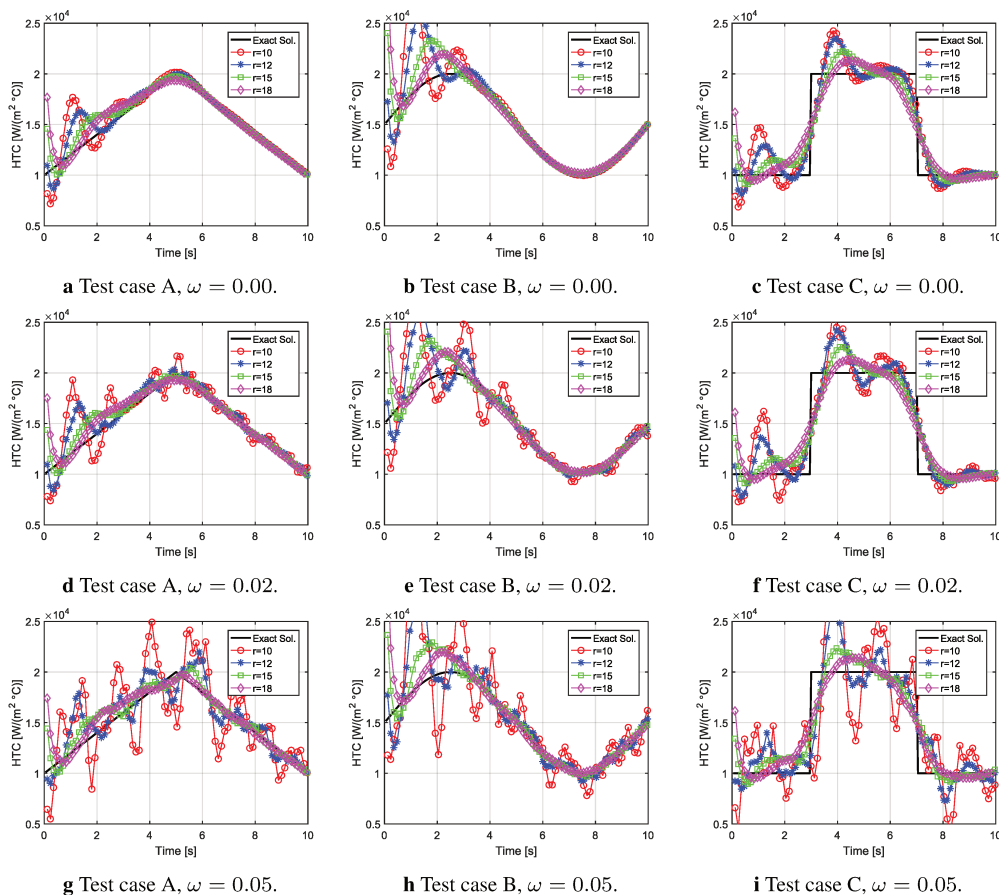


**Figura A.3:** One dimensional discretization and main features of the inverse set up.

Table A.2 summarizes the error values and the computing times obtained under the proposed SQNM and the Beck's SFSM for the two levels of noise and also for the noiseless case, for all the considered future time steps parameter, and also for the three levels of noise. On the other hand, Fig. A.4 shows the reconstructed HTC considering the different values of the parameter  $r$ , and also for the three levels of noise. For a better understanding, the results depicted corresponds only to the values obtained with SQNM.

**Tabla A.2:** Errors obtained with the proposed SQNM together with the values achieved with SFSM.

Future time steps	Noise level	Inverse Method	<i>Test case A</i>		<i>Test case B</i>		<i>Test case C</i>	
			Computing time [s]	RMSE ( $\times 1.0e3$ )	Computing time [s]	RMSE ( $\times 1.0e3$ )	Computing time [s]	RMSE ( $\times 1.0e3$ )
$r = 10$	$\omega = 0.00$	SQNM	0.6349	1.3023	0.6505	2.4581	0.6569	1.8560
		SFSM	0.4921	1.4248	0.4612	2.5494	0.5028	1.9597
	$\omega = 0.02$	SQNM	0.6327	1.6203	0.6557	2.6929	0.6589	2.2027
		SFSM	0.4762	1.6625	0.4494	2.7456	0.5163	2.2048
	$\omega = 0.05$	SQNM	0.7715	2.8467	0.6937	3.5194	0.7728	3.8665
		SFSM	0.4980	2.6704	0.4904	3.3543	0.6749	3.6875
$r = 12$	$\omega = 0.00$	SQNM	0.6753	0.9373	0.6689	1.7195	0.9200	1.5959
		SFSM	0.4365	1.0223	0.3934	1.8043	0.3909	1.7044
	$\omega = 0.02$	SQNM	0.6984	1.0240	0.6877	1.8146	0.7268	1.7764
		SFSM	0.4095	1.1136	0.4256	1.8837	0.4050	1.8652
	$\omega = 0.05$	SQNM	0.6842	1.4117	0.6937	2.0827	0.6961	2.2208
		SFSM	0.4142	1.4621	0.4610	2.1163	0.4229	2.2179
$r = 15$	$\omega = 0.00$	SQNM	0.8232	0.7886	0.9049	1.3970	1.2920	1.5800
		SFSM	0.4670	0.7007	0.4551	1.1977	0.4476	1.5958
	$\omega = 0.02$	SQNM	0.8476	0.7791	0.8387	1.3797	0.8218	1.6261
		SFSM	0.4680	0.7273	0.4875	1.1862	0.4497	1.6432
	$\omega = 0.05$	SQNM	0.8251	0.8491	0.8276	1.3363	1.0033	1.7227
		SFSM	0.4632	0.7976	0.4838	1.2111	0.4576	<b>1.7359</b>
$r = 18$	$\omega = 0.00$	SQNM	0.9713	0.9744	1.0495	1.7887	1.3698	1.7413
		SFSM	0.5327	0.6221	0.5078	1.0570	0.4861	1.6546
	$\omega = 0.02$	SQNM	0.9784	0.9600	0.9923	1.7934	0.9889	1.7436
		SFSM	0.5314	0.6298	0.5301	1.0545	0.5035	1.6639
	$\omega = 0.05$	SQNM	0.9705	0.9678	0.9717	1.7519	0.9641	1.7303
		SFSM	0.5253	0.6402	0.5889	1.0447	0.5012	<b>1.6447</b>



**Figure A.4:** Reconstruction of HTC achieved with SQNM.

## 5. Discussion

Previously to the discussion of the results obtained with the proposed method, it is worth mentioning that the traditional SCGM applied for the reconstruction of the different HTC functions exhibited an extremely oscillatory and even diverging behavior for all the considered cases. Since the search step size  $\beta_k$  is computed by and actual minimization of a uni-variate function of  $\beta$  (which constitutes an exact line search method), the updating of the direction of descent becomes the only problem in which we need to focus. The described behavior was obtained under both the classical Fletcher-Reeves or Polak-Ribiere updating methods, even with the consideration of a restart strategy (Nocedal y Wright, 2006; Colaco y Orlande, 1999). Moreover, we found in some cases that the updated directions were not even a descent direction (the property  $\mathbf{d}_k^T \nabla S_k < 0$  was not fulfilled). Such a behavior could be related to the non-linearities of the objective function appearing during the iterative process. In such cases, a scaling of the design variables may help (Nocedal y Wright, 2006), although it is a strategy that is reported in none of the reviewed articles regarding inverse estimation in heat transfer processes.

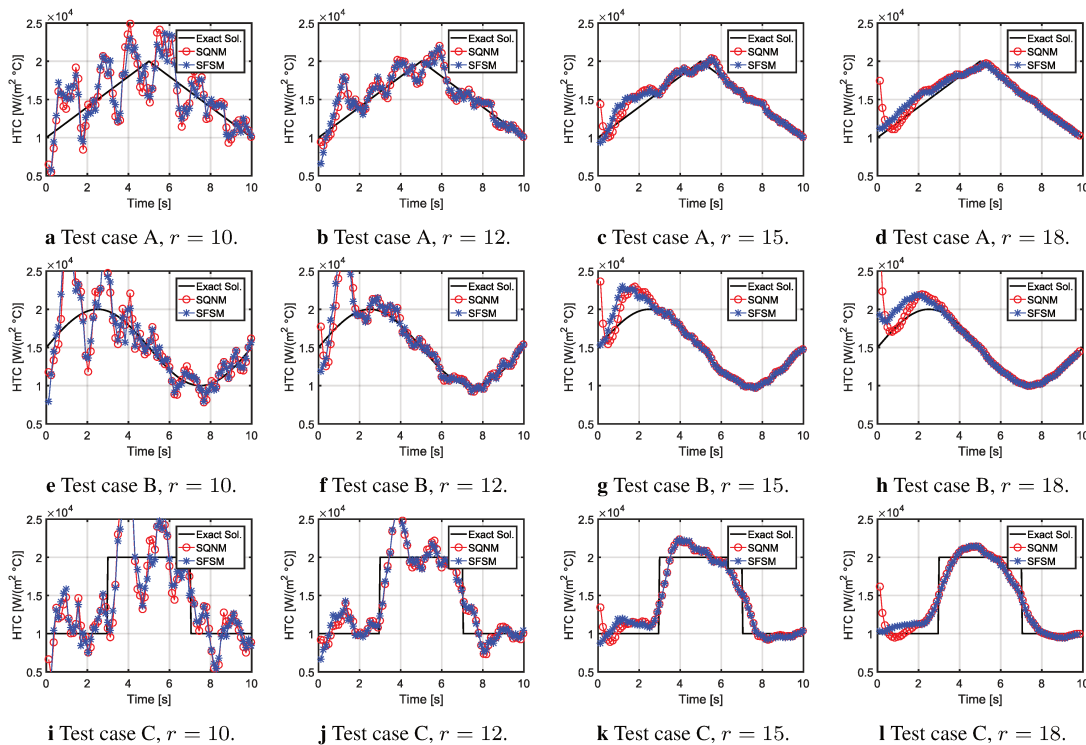
The SQNM circumvented efficiently all the mentioned issues present when using SCGM,



without the need of a re-scaling and/or implementation of non-traditional updating strategies. From the previous section, it can be seen that the reconstructions exhibit some deviations and oscillatory behavior from the exact values approximately at the first third of the time domain for all the studied cases. An improvement in the quality of the reconstructions is noticed as time evolves toward greater values, reaching an almost perfect match with the data at the last third of the time interval for smoothly- and continuously-varying exact HTC, namely test cases A and B. The accuracy in the reconstruction of the square-wave (test case C) is less precise than in the previous cases because the algorithm smoothed out the jump discontinuity. A possible explanation for the described qualitative behavior is that during the first sequences the available information, namely the  $\mathbf{Y}^r$  vector, has very little information about the physics of the problem. As time evolves, the information provided by the measured temperature vector becomes more significant. In presence of measurement errors, its effect is even more adverse in the sequential solution because the shorter time domain results in an increased ill-conditioning of the problem.

Another noteworthy feature is that all the reconstructions suffer from an over-shooting at the first time instant for  $r > 12$ , being such feature more pronounced in test case B. In the right-after computed values, the reconstructions fit better the exact solution while the mentioned over-shootings disappear. This behavior could be attributed to a possible convergence to a local minimum because the seed in the iterative process is chosen randomly. It can be stated that such sensitivity to the initial point of the optimization process has a somewhat little effect on the quality of the reconstruction, since the over-shooting tends to disappear within the first sequences. However, it also constitutes a drawback of the proposed method.

The presence of noise in the data set led to an increase in the oscillations, being such effect more noticeable for lower values of the future time steps parameter  $r$ . Although the increase of such parameter led to a stabilization of the reconstructions, they also evidenced a damping effect which resulted in over-smoothing of the heat flux discontinuity for test case C. For  $r > 12$ , the computed HTC are qualitatively acceptable. Another aspect that arises when comparing the reconstructions for all the test cases in terms of the RMS error is that the sensitivity of the proposed method with respect to input data errors is very low when  $r \geq 15$ . For instance, the values of the RMS error (see Table A.2) for  $r = 18$  are very similar to each other. However, it is worth to mention that the assumption of the linearity of the problem in every sequence is less valid as the number of future time steps increases.



**Figure A.5:** Reconstruction of HTC for  $\omega = 0.05$ , achieved with SQNM and SFSM

As representative cases, Fig. A.5 depicts a comparison of the reconstructions achieved by the proposed method with those obtained with the Beck's SFSM for  $\omega = 0.05$ , which actually corresponds to the most adverse situation. It can be seen that Beck's method also exhibits an oscillatory behavior at the first third of the time domain. The reconstructions are qualitatively very similar, except for the over-shooting that appear in the solutions using SQNM at the first instant of the time domain.

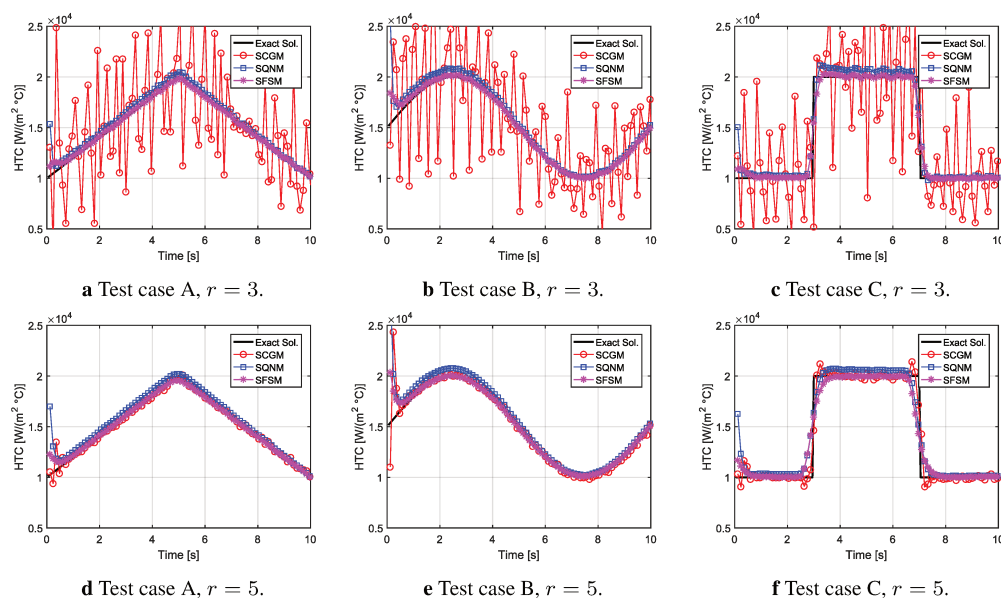
Since the quasi-Newton strategy provides at most a super-linear convergence, the number of iterations within every computing sequence is expected to be near the value of the parameter  $r$ , which holds the dimension of such sequences (Nocedal y Wright, 2006). For this reason, the computing time corresponding to the proposed method is expected to be similar to that attained with SFSM. From Table A.2 it can be noticed that the computing times achieved via the Beck's SFSM are, in general, slightly lower than those corresponding to the proposed SQNM. However, the values of the RMS error are almost the same and even lower in some reconstructions attained with the proposed method.

### 5.1. Influence of sensor placement

The results exhibited so far correspond to the most unfavorable location of the sensor within the body ( $x_s = L$ ). However, the influence of the sensor placement must be studied to reveal the actual limitations and strengths of each method. In order to assess the sensitivity of the reconstruc-

tions with respect to the sensor placement, the noisy data sets with  $\omega = 0.05$  (which constitutes the worst-case scenario) are taken into account. Many values of the parameter  $r$  are studied for each location. For the SCGM, the conjugate coefficient  $\gamma_k$  is computed via the Polak-Ribiere formula along with a restart strategy.

**Sensor placed at  $x_s = L/4$ .** Fig. A.6a-A.6c depicts the reconstructions achieved with  $r = 3$  for each solution strategy. Both the proposed method and Beck's SFSM are capable of qualitatively recovering the exact transient HTC. However, the reconstruction with SFSM is the most accurate. All the estimated functions with SQNM are slightly above the exact values. Another noteworthy aspect is that the over-shootings in the reconstructions with SQNM are still present. On the other hand, the traditional SCGM is unable to reconstruct the exact values.



**Figure A.6:** Reconstruction of HTC when  $x_s = L/4$  ( $\omega = 0.05$ ).

As depicted in Fig. A.6d-A.6f, the reconstructions achieved with the three methods are very precise when considering more future time data, namely  $r = 5$ , except for the two or three first steps where both the SCGM and SQNM exhibited some discrepancies from the exact values.

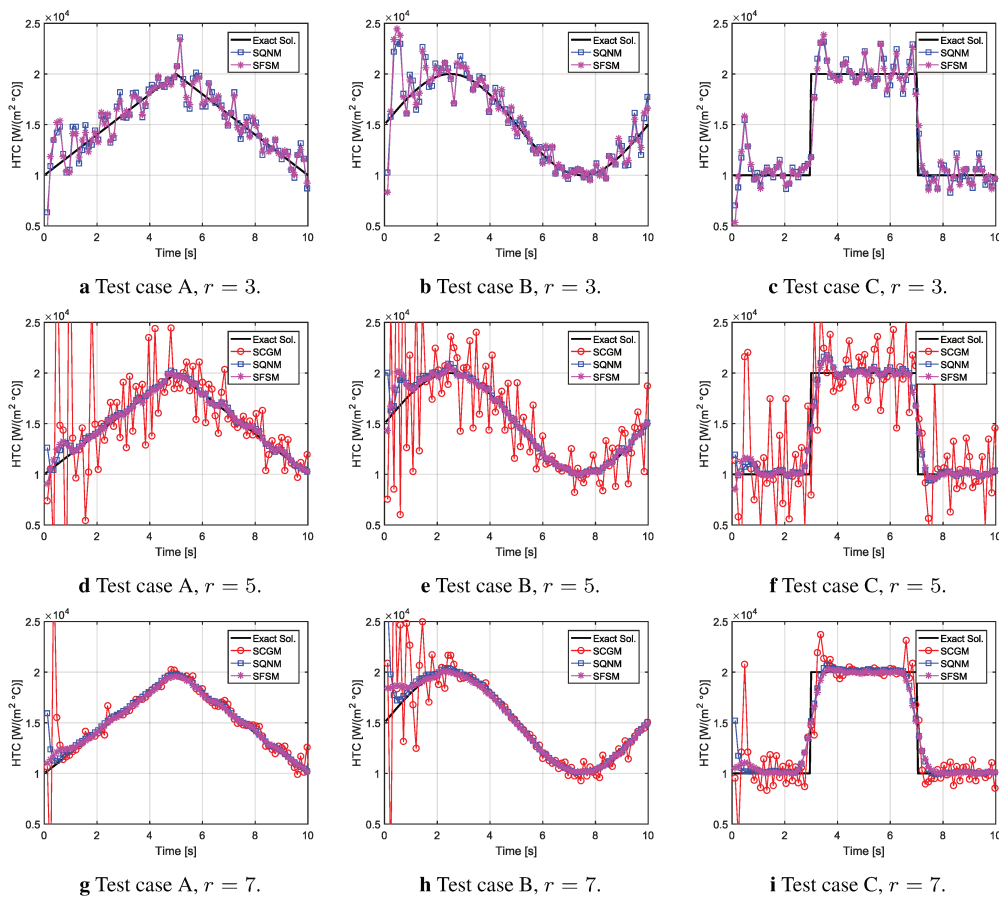
From these results, we can affirm that both the traditional SCGM and the proposed SQNM are appropriate for recovering the exact transient HTC when sufficient future time values are considered, in the case where the measurement location is near the boundary with unknown HTC values.

**Sensor placed at  $x_s = L/2$ .** Both SQNM and Beck's SFSM were able to reconstruct the exact HTC values for  $r = 3$ , whereas the SCGM algorithm diverged in the three test cases. Fig. A.7a-A.7c depicts the results achieved only under the first two methods. The reconstructions are very

similar in all three cases.

SCGM also has exhibited difficulties to properly reconstruct the exact HTC values when the future time parameter was risen to  $r = 5$ , as can be observed in Fig. A.7d-A.7f. On the other hand, both SQNM and Beck's SFSM were able to recover the exact HTC functions. Unlike the results when  $x_s = L/4$ , the latter two reconstructions for the three test cases are virtually indistinguishable, meaning that there are no significant over-estimations in the results obtained via SQNM.

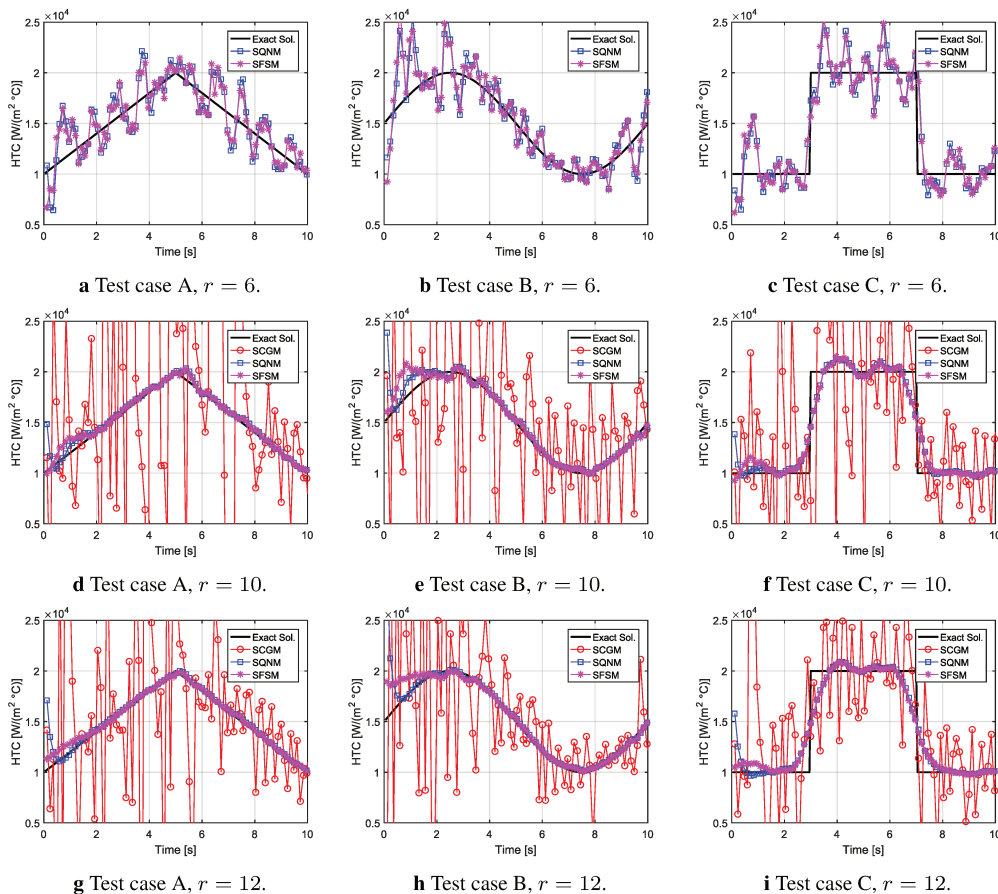
When considering even more future time values, namely  $r = 7$  (see Fig. A.7g-A.7i), it is noticeable that SCGM has still exhibited issues in the appropriate reconstruction of the exact HTC functions, exhibiting large discrepancies and oscillations. On the other hand, the reconstructions obtained under both SQNM and SFSM were more precise than in the case where  $r = 5$ , since the additional features gathered with more future time information give rise to an improvement of the results achieved.



**Figura A.7:** Reconstruction of HTC when  $x_s = L/2$  ( $\omega = 0.05$ ).

**Sensor placed at  $x_s = 3L/4$ .** In this scenario, the minimum value required for the future time parameter to allow convergence was  $r = 6$ , except for the SCGM strategy. Although both SQNM and SFSM allowed the achievement of a solution, the quality of the reconstructions is not good

since the available information is not enough (see Fig. A.8a-A.8c). When considering  $r = 10$  and  $r = 12$ , it is clear that SCGM was not capable of providing a solution. The results computed under both SQNM and SFSM got better as parameter  $r$  increased. However, the first two or three reconstructed values are affected by the over-shooting previously observed. The corresponding results are shown in Fig. A.8d-A.8f and A.8g-A.8i, respectively.



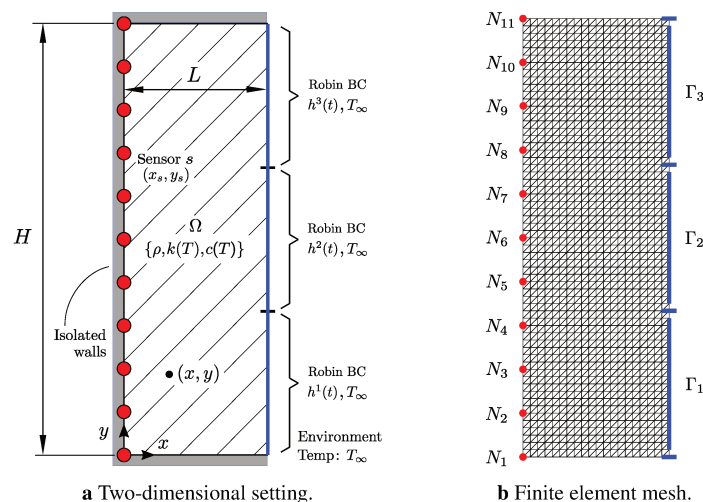
**Figure A.8:** Reconstruction of HTC when  $x_s = 3L/4$  ( $\omega = 0.05$ ).

## 5.2. Extending the SQNM beyond one-dimensional problems

The main focus of the present work was the assessment of a novel inverse technique for solving non-linear heat conduction problems in a one-dimensional framework. The controlled conditions of such one-dimensional implementation allowed the evaluation of the numerical performance of the SQNM through specially designed computational experiments. The low computational cost was crucial to achieve a comprehensive parametric analysis of the method proposed in this communication. Several recent works are available in the literature where the assessment of the proposed techniques for the solution of the IHCP is limited to such one-dimensional controlled cases (Xiong et al., 2020; Najafi et al., 2015a; Kameli y Kowsary, 2014; Singhal et al., 2020; da Siva Ignacio et al., 2020; Tourn et al., 2021; Jahangiri et al., 2019). However, it is worth mentioning that

we can straightforwardly extend the SQNM formulated in this communication to deal with two- and three-dimensional non-linear problems. In this regard, we propose solving a two-dimensional inverse problem over a simple geometry having multiple sensors and many unknown independent transient HTC to be estimated. This experiment is a well-known benchmark problem conceived to assess the suitability and reliability of both novel methods or alternative implementations of existing ones (Najafi et al., 2015b; Razzaghi et al., 2019; Yang y Chen, 2011; Cui et al., 2015). Successfully implementing such a two-dimensional benchmark gives rise to the possibility of further extend the current approach to deal with more complicated applications.

Figure A.9a depicts the rectangular cross-section of an infinitely long 1008 steel beam. The material properties are the same as defined in table A.1. The dimensions are  $L = 0.01$  m and  $H = 3L = 0.03$  m. The right boundary is exposed to  $N_\Gamma = 3$  different and independent HTC functions, whereas the remaining boundaries are isolated. Each of these  $h^j(t)$  transient coefficients ( $j = 1, 2, 3$ ) acts on non-overlapping portions  $\Gamma_j$  of the right boundary. Since the number of temperature measurements must be greater or equal to the number of unknowns to ensure the uniqueness of the solution, we employ  $N_s = 11$  sensors at the left boundary, being the most difficult condition for the inverse reconstruction method. The initial and environment temperatures are  $T_0 = 850^\circ\text{C}$  and  $T_\infty = 350^\circ\text{C}$ , respectively. We perform a domain discretization through a finite element mesh of 2400 linear triangular elements. Such a discretization is shown in figure A.9b.



**Figure A.9:** Two-dimensional geometry and FEM mesh, together with the main features of the problem.

The one-dimensional formulation already presented in sections 2 and 3 must be updated to deal with the features involved in the two-dimensional framework. In this sense, we write the

corresponding IBVP as

$$\begin{aligned}
\rho c(T) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot (k(T) \nabla T(x, y, t)), \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad t_0 < t \leq t_f \\
-k(T) \frac{\partial T(L, y, t)}{\partial x} &= h^j(t) [T(L, y, t) - T_\infty], \quad (h^j(t) \text{ unknown}), \quad \text{at } x = L, \quad y \in \Gamma_j \quad (j = 1, 2, 3), \quad t_0 < t \leq t_f, \\
k(T) \frac{\partial T(0, y, t)}{\partial x} &= 0, \quad \text{at } x = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \\
k(T) \frac{\partial T(x, 0, t)}{\partial y} &= 0, \quad \text{at } y = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \\
k(T) \frac{\partial T(x, H, t)}{\partial y} &= 0, \quad \text{at } y = H, \quad t_0 < t \leq t_f, \\
T(x, y, 0) &= T_0(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad t = 0,
\end{aligned}$$

where  $T(x, y, t)$  is the temperature at position  $(x, y)$  and time  $t$ , and  $T_0(x, y)$  is the spatial temperature field at  $t = 0$ . Both the finite element implementation and the related iterative solution procedure defined in equations (B.2) and (A.4) are straightforwardly extended to the two-dimensional case.

To take into account the presence of many sensors and the influence of the HTC  $h^j(t)$  on the temperature, the two-dimensional version of the objective function (A.5) is re-defined (Ozisik, 2000; Razzaghi et al., 2019; Farahani et al., 2014; Luchesi y Coelho, 2012; Yang y Chen, 2011) as

$$\begin{aligned}
S[h^{1,2,3}(t)] &= \sum_{i=1}^{N_s} \int_{t_0}^{t_f} [T(x_i, y_i, t; h^{1,2,3}(t)) - Y_i(t)]^2 dt \\
&= \sum_{i=1}^{N_s} \int_{t_0}^{t_f} \int_{x=0}^{x=L} \int_{y=0}^{y=H} [T(x_i, y_i, t; h^{1,2,3}(t)) - Y_i(t)]^2 \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) dy dx dt.
\end{aligned}$$

Following the same approach described in section 3.2, the sensitivity problem for the two-dimensional formulation can be stated (Ozisik, 2000; Razzaghi et al., 2019; Helmig et al., 2020; Chen et al., 2014) as

$$\begin{aligned}
\rho c(T) \frac{\partial \Delta T(x, y, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot (k(T) \nabla (\Delta T(x, y, t))), \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad t_0 < t \leq t_f \\
-k(T) \frac{\partial \Delta T(L, y, t)}{\partial x} &= [h^j(t) + \Delta h^j(t)] \Delta T(L, y, t) + \Delta h^j(t) [T(L, y, t) - T_\infty], \\
&\quad \text{at } x = L, \quad y \in \Gamma_j \quad (j = 1, 2, 3), \quad t_0 < t \leq t_f \\
k(T) \frac{\partial \Delta T(0, y, t)}{\partial x} &= 0, \quad \text{at } x = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \\
k(T) \frac{\partial \Delta T(x, 0, t)}{\partial y} &= 0, \quad \text{at } y = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \\
k(T) \frac{\partial \Delta T(x, H, t)}{\partial y} &= 0, \quad \text{at } y = H, \quad t_0 < t \leq t_f, \\
\Delta T(x, y, 0) &= 0, \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad t = 0.
\end{aligned}$$

The adjoint problem for the two-dimensional setting is derived according to the procedure

presented in section 3.3, starting with the definition of the augmented functional  $\tilde{S}[h^{1,2,3}(t)]$  as

$$\begin{aligned} \tilde{S}[h^{1,2,3}(t)] = & \sum_{i=1}^{N_s} \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L \int_0^H [T(x_i, y_i, t; h^{1,2,3}(t)) - Y_i(t)]^2 \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) dy dx dt + \dots \\ & \dots + \int_{t_0}^{t_f} \int_0^L \int_0^H \lambda(x, y) \left\{ \rho c(T) \frac{\partial T(x, y, t)}{\partial t} - \nabla \cdot (k(T) \nabla T(x, y, t)) \right\} dy dx dt \end{aligned}$$

Then, the strong formulation of the corresponding IBVP adjoint formulation is obtained in a similar manner as implemented in references (Molavi et al., 2013; Helmig et al., 2020; Razzaghi et al., 2019; Luchesi y Coelho, 2012; Chen et al., 2014), leading to

$$\begin{aligned} \rho c(T) \frac{\lambda(x, y, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (k(T) \nabla \lambda(x, y, t)) = & 2 \sum_{i=1}^{N_s} [T(x_i, y_i, t; h^{1,2,3}(t)) - Y_i(t)] \delta(x - x_i) \delta(y - y_i), \\ & \forall (x, y) \in \Omega, \quad t_0 \leq t < t_f \\ -k(T) \frac{\lambda(L, y, t)}{\partial x} = & h^j(t) \lambda(L, y, t), \quad \text{at } x = L, \quad y \in \Gamma_j \quad (j = 1, 2, 3), \quad t_0 \leq t < t_f \\ k(T) \frac{\lambda(0, y, t)}{\partial x} = & 0, \quad \text{at } x = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \\ k(T) \frac{\lambda(x, 0, t)}{\partial y} = & 0, \quad \text{at } y = 0, \quad t_0 < t \leq t_f, \\ k(T) \frac{\lambda(x, H, t)}{\partial y} = & 0, \quad \text{at } y = H, \quad t_0 < t \leq t_f, \\ \lambda(x, y, t_f) = & 0, \quad \forall (x, y) \in \Omega, \quad t = t_f. \end{aligned}$$

The equation for computing the gradient of the augmented functional  $\tilde{S}$  is obtained as described in section 3.4, and also taking into account references such as Ozisik (2000); Razzaghi et al. (2019); Helmig et al. (2020); Huang y Tsai (2005); Yang y Chen (2011), to obtain the following expression

$$\nabla \tilde{S}[h^{1,2,3}(t)] = \lambda(L, y, t) [T(L, y, t) - T_\infty].$$

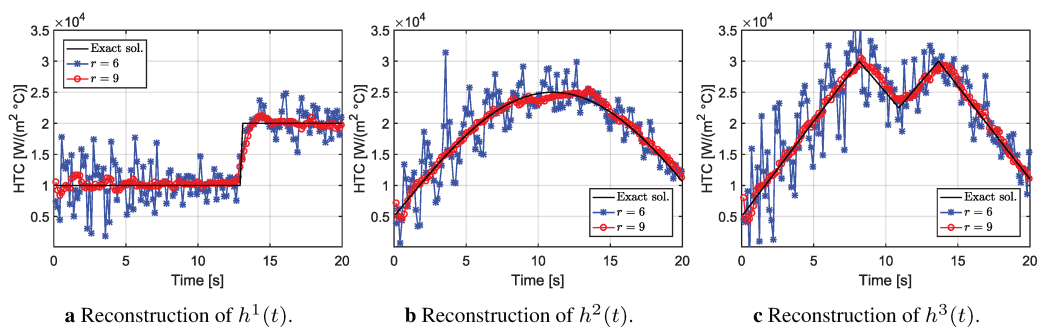
Finally, the iterative procedure defined in section 3.5 must be re-formulated as  $h_{k+1}^j(t) = h_k^j(t) + \beta_k d_k^j(t)$ . The computation of the direction of descent  $d_k^j(t)$  is performed via the BFGS formulation already described. The expression for computing the step size  $\beta_k$  is derived similarly as described in section 3.5, leading (Ozisik, 2000; Luchesi y Coelho, 2012; Huang y Tsai, 2005; Liang et al., 2013) to

$$\beta_k = \frac{\sum_{i=1}^{N_s} \int_{t_0}^{t_f} \{T(x_i, y_i, t; h_k^{1,2,3}(t)) - Y_i(t)\} \Delta T(x_i, y_i, t; d_k^{1,2,3}(t)) dt}{\sum_{i=1}^{N_s} \int_{t_0}^{t_f} [\Delta T(x_i, y_i, t; d_k^{1,2,3}(t))]^2 dt}.$$

The whole inverse procedure is similar to that described in section 4. First of all, we perform a direct run using the three exact transient heat transfer coefficients acting at each portion of the bottom boundary to obtain the temperature histories at the placement of the sensors. In a



second stage, we formulate the inverse problem by using the temperature histories previously obtained at the location of the sensors as input data to reconstruct the transient HTC distributions at each boundary portion, which are unknown for the inverse case. A level of  $\omega = 0.05$  normally distributed random errors is added to the exact temperature distributions at the locations of the sensors obtained in the direct run. We use two values for the future time steps parameter, namely  $r = 6$  and  $r = 9$ . The duration of the transient analysis is  $t_f = 20$  seconds, being  $M_d = 240$  the number of time steps in the direct run and  $M = 160 < M_d$  the number of partitions of the time domain in the inverse run.



**Figure A.10:** Reconstruction of the three different transient heat transfer coefficient functions  $h^1(t)$ ,  $h^2(t)$ , and  $h^3(t)$  acting on the boundary portions  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_2$ , and  $\Gamma_3$ , respectively.

Figure A.10 depicts the reconstructions of the three transient heat transfer coefficient functions from the temperature histories at the locations of the sensors. The results obtained in this two-dimensional experiment confirmed the suitability and reliability of the proposed method in recovering different transient HTC functions having very distinct features such as shapes, continuity, and extreme values. Similar to the one-dimensional case, the quality of the reconstructions improves substantially from the lowest value of the future time steps parameter  $r$ . Despite the short-frequency, high-amplitude oscillations, the method captured the shapes of the exact functions with  $r = 6$ . In contrast, the reconstructions were more precise when  $r = 9$ . However, we can observe some low-amplitude oscillations in the reconstructed Heaviside-like exact function (see figure A.10a) located both at the beginning of the transient analysis and after the discontinuity. However, such wiggles do not affect the appropriate recovering of the exact function features. On the other hand, the SQNM achieved a superior reconstruction quality in the remaining two cases, as exhibited in figures A.10b and A.10c.

In comparison with the performance of the SQNM in one-dimensional cases, the reconstructions are very close to the exact values during the whole transient analysis. Such improvement is due to the availability of temperature information from many sensors at each time step with respect to the number of unknowns, which allowed achieving better predictions.

## 6. Conclusions

A novel gradient-based sequential inverse estimation method for reconstructing transient heat transfer coefficient in the context of a non-linear heat conduction problem has been introduced in this communication. Such a procedure is a modification of the traditional sequential conjugate gradient method. Instead of employing the concept of conjugate directions to compute the descent direction, we introduced a quasi-Newton updating strategy. The resulting method is appointed as the sequential quasi-Newton method. Compared with the reconstructions achieved under the sequential conjugate gradient strategy, the proposed technique yielded more reliable, stable, and accurate results. We found that the unstable behavior of the conjugate gradient algorithm was related to the sensitivity of the problem concerning the location of the measurement points within the body. In this regard, the proposed method accurately captured the physics of the heat transfer phenomena in a variety of cases involving noisy measurements, under a wide range of values for the parameter  $r$ . The simple implementation of the quasi-Newton step avoided the need for re-scaling and/or restarting strategies commonly involved in the conjugate gradient environment. We also demonstrated the competitiveness of the proposed method both in terms of the reconstruction quality and computing times compared to the reconstructions achieved under Beck's sequential function specification method. The reliability of the proposed sequential method makes it suitable to compute transient heat transfer coefficient during non-linear heat transfer processes in an online and remarkably simple manner. Finally, a two-dimensional implementation was developed to show the capability of the proposed method for computing spatially- and temporarily variable heat transfer coefficients in presence of multiple sensors. This also serves to demonstrate the straightforward extension of the proposed sequential quasi-Newton method to complex engineering problems in two and three dimensions.

## References

- Alifanov O.M. *Inverse Heat Transfer Problems*. Springer, 1994.
- Azimi A., Bamdad K., y Ahmadikia H. Inverse hyperbolic heat conduction in fins with arbitrary profiles. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 61(3):220–240, 2012.
- 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.
- Bozzoli F., Cattani L., Rainieri S., y Pagliarini G. Estimation of local heat transfer coefficient in coiled tubes under inverse heat conduction problem approach. *Experimental thermal and fluid science*, 59:246–251, 2014.

- Cao K. y Lesnic D. Determination of space-dependent coefficients from temperature measurements using the conjugate gradient method. *Numerical Methods for Partial Differential Equations*, 34(4):1370–1400, 2018.
- Chen H.T., Chou H.Y., Tseng H.C., y Chang J.R. Numerical study on natural convection heat transfer of annular finned tube heat exchanger in chimney with experimental data. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 127:483–496, 2018.
- Chen W.L., Chou H.M., Lee H.L., y Yang Y.C. An inverse hyperbolic heat conduction problem in estimating base heat flux of two-dimensional cylindrical pin fins. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 52:90–96, 2014.
- Colaco M.J. y Orlande H.R. Comparison of different versions of the conjugate gradient method of function estimation. *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, 36(2):229–249, 1999.
- Cui M., Li N., Liu Y., y Gao X. Robust inverse approach for two-dimensional transient nonlinear heat conduction problems. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 29(2):253–262, 2015.
- da Siva Ignacio L.H., Malheiros F.C., Figueiredo A.A.A., Duarte C.A.R., y Fernandes H. Heat flux estimation using simplified models by means of deviation time. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 114:104592, 2020.
- Dowding K. y Beck J. A sequential gradient method for the inverse heat conduction problem (IHCP). *Journal of heat transfer*, 121(2):300–306, 1999.
- Farahani S., Kowsary F., y Jamali J. Direct estimation of local convective boiling heat transfer coefficient in mini-channel by using conjugated gradient method with adjoint equation. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 55:1–7, 2014.
- Farahani S.D. y Kowsary F. Experimental estimation of convective heat transfer coefficient from pulsating semi-confined impingement air slot jet by using inverse method. *Heat and Mass Transfer*, 53(9):2853–2866, 2017.
- Hager W.W. y Zhang H. A survey of nonlinear conjugate gradient methods. *Pacific journal of Optimization*, 2(1):35–58, 2006.
- Handbook A.S.M. Volume 1. *Properties and Selection: Irons, Steels, and High Performance Alloys*, 1, 2005.
- Helmig T., Al-Sibai F., y Kneer R. Estimating sensor number and spacing for inverse calculation of thermal boundary conditions using the conjugate gradient method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 153:119638, 2020.
- Huang C.H. y Tsai Y.L. A transient 3-d inverse problem in imaging the time-dependent local heat transfer coefficients for plate fin. *Applied Thermal Engineering*, 25(14-15):2478–2495, 2005.
- Jahangiri A., Mohammadi S., y Akbari M. Modeling the one-dimensional inverse heat transfer problem using a Haar wavelet collocation approach. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 525:13–26, 2019.
- Jarny Y., Ozisik M., y Bardon J. A general optimization method using adjoint equation for solving multidimensional inverse heat conduction. *International journal of heat and mass transfer*, 34(11):2911–2919, 1991.

- Joachimia M., Joachimia D., Ciałkowski M., Małdziński L., Okoniewicz P., y Ostrowska K. Analysis of the heat transfer for processes of the cylinder heating in the heat-treating furnace on the basis of solving the inverse problem. *International Journal of Thermal Sciences*, 145:105985, 2019.
- Kameli H. y Kowsary F. A new inverse method based on Lattice Boltzmann method for 1D heat flux estimation. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 50:1–7, 2014.
- Keanini R.G., Ling X., y Cherukuri H.P. A modified sequential function specification finite element-based method for parabolic inverse heat conduction problems. *Computational Mechanics*, 36(2):117–128, 2005.
- Kim S., Chung B.J., Kim M.C., y Kim K.Y. Inverse estimation of temperature-dependent thermal conductivity and heat capacity per unit volume with the direct integration approach. *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, 44(5):521–535, 2003a.
- 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, 2003b.
- Kim S.K., Lee W.I., y Lee J.S. Solving a nonlinear inverse convection problem using the sequential gradient method. *KSME international journal*, 16(5):710–719, 2002.
- Lamm P.K. Future-sequential regularization methods for ill-posed Volterra equations: Applications to the inverse heat conduction problem. *Journal of mathematical analysis and applications*, 195(2):469–494, 1995.
- Liang L., Xu H., y Ke Z. An improved three-dimensional inverse heat conduction procedure to determine the tool-chip interface temperature in dry turning. *International Journal of Thermal Sciences*, 64:152–161, 2013.
- Luchesi V.M. y Coelho R.T. An inverse method to estimate the moving heat source in machining process. *Applied Thermal Engineering*, 45:64–78, 2012.
- Molavi H., Rezapour J., Noori S., Ghasemloo S., y Aslani K.A. Novel gradient-based methods for heat flux retrieval. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 2013.
- Mueller J.L. y Siltanen S. *Linear and nonlinear inverse problems with practical applications*. SIAM, 2012.
- Najafi H., Woodbury K.A., y Beck J.V. A filter based solution for inverse heat conduction problems in multi-layer mediums. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 83:710–720, 2015a.
- Najafi H., Woodbury K.A., y Beck J.V. Real time solution for inverse heat conduction problems in a two-dimensional plate with multiple heat fluxes at the surface. *International journal of heat and mass transfer*, 91:1148–1156, 2015b.
- Ngo T.T., Huang J.H., Than V.T., y Wang C.C. A BFGS and simple step method for estimating the interface temperature in 2D ultrasonic seam welding. *Applied Thermal Engineering*, 115:1031–1044, 2017.
- Ngo T.T., Huang J.H., y Wang C.C. The bfgs method for estimating the interface temperature and convection coefficient in ultrasonic welding. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 69:66–75, 2015.
- Ngo T.T., Huang J.H., y Wang C.C. Inverse simulation and experimental verification of temperature-dependent thermophysical properties. *International Communications in Heat and Mass Transfer*,

- 71:137–147, 2016.
- Nocedal J. y Wright S. *Numerical optimization*. Springer Science & Business Media, 2006.
- Osman A. y Beck J. Investigation of transient heat transfer coefficients in quenching experiments. *Journal of Heat Transfer*, 112(4):843–848, 1990.
- Ozisik M.N. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. CRC Press, 2000.
- Rahmani R.K., Molavi H., Ayasoufi A., Koomullil R.P., y Cheng G. Solution of radiative boundary design problems using a combined optimization technique. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 57(5):348–371, 2010.
- 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.
- Reinhardt H.J. y Hào D.N. A sequential conjugate gradient method for the stable numerical solution to inverse heat conduction problems. *Inverse Problems in Engineering*, 2(4):263–272, 1996.
- Rezapour J., Molavi H., Daneshian B., y Bahrami H.R.T. A comparative study of gradient-type methods for recovering time-dependent heat sources. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 38(9):2545–2556, 2013.
- Sagheby S.H. y Kowsary F. Experimental design and methodology for estimation of local heat transfer coefficient in jet impingement using transient inverse heat conduction problem. *Experimental heat transfer*, 22(4):300–315, 2009.
- Singhal M., Singla R.K., y Goyal K. A novel comparative approach on inverse heat transfer analysis of an experimental setup of an extended surface. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 118:104822, 2020.
- Skubisz P. y Adrian H. Estimation of heat transfer coefficient of forced-air cooling and its experimental validation in controlled processing of forgings. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 73(3):163–176, 2018.
- Su J. y Hewitt G.F. Inverse heat conduction problem of estimating time-varying heat transfer coefficient. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 45(8):777–789, 2004.
- Tourn B.A., Álvarez Hostos J.C., y Fachinotti V.D. Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear inverse heat conduction problems concerning the estimation of surface heat fluxes. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 125:105330, 2021.
- Xiong P., Deng J., Lu T., Lu Q., Liu Y., y Zhang Y. A sequential conjugate gradient method to estimate heat flux for nonlinear inverse heat conduction problem. *Annals of Nuclear Energy*, 149:107798, 2020.
- Yang Y.C. y Chen W.L. A nonlinear inverse problem in estimating the heat flux of the disc in a disc brake system. *Applied Thermal Engineering*, 31(14-15):2439–2448, 2011.



## **Anexo B**

# **Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear Inverse Heat Conduction Problems concerning the estimation of surface heat fluxes**

El artículo presentado a continuación ha sido publicado en la revista “**International Communications in Heat and Mass Transfer**”:

B.A. Tourn, J.C. Álvarez Hostos, V.D.Fachinotti, “*Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear Inverse Heat Conduction Problems concerning the estimation of surface heat fluxes*”.





# Implementation of total variation regularization-based approaches in the solution of linear Inverse Heat Conduction Problems concerning the estimation of surface heat fluxes

B.A. Tourn<sup>1</sup>, J.C. Álvarez Hostos<sup>2</sup>, V.D. Fachinotti<sup>2,1</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación y Transferencia Rafaela (UNRaf-CONICET), CP2300 Santa Fe, Argentina

<sup>1</sup>CIMEC-UNL-CONICET, Predio Conicet “Dr Alberto Cassano”, CP 3000 Santa Fe, Argentina

Keywords: IHCP, Surface heat flux, total variation regularization, FEM, L-curve criterion, lagged diffusivity fixed point iteration, iteratively reweighted least-squares, split Bregman iteration

## Abstract

In this work, we propose the extension of total variation regularization strategies in principle formulated to be implemented in image processing and signal analysis research fields, to the solution of one-dimensional linear inverse heat conduction problems concerning the estimation of surface heat fluxes. Three solution procedures are considered in the current study, and these include the lagged diffusivity fixed point iteration, the iteratively reweighted least-squares, and the split Bregman iteration methods. The performance of such procedures is tested using four cases, and the regularization parameter is selected via the L-curve criterion. The results are compared to the reconstruction obtained via a classical Tikhonov-like strategy. The main outcome is that the staircase effect dominated all the reconstructions. Despite it deteriorated the quality of the solutions in some specific cases, it did not prevent the appropriate fulfillment of the reconstruction task. The results achieved in this communication have been useful to demonstrate the suitability and reliability of extending total variation approaches to the solution of linear inverse heat conduction pro-

---

<sup>1</sup>Corresponding author. E-mail address: vfachinotti@cimec.unl.edu.ar (V.D. Fachinotti).

blems concerning the estimation of surface heat fluxes, as an appropriate and novel alternative to standard procedures.

## 1. Introduction

The inverse heat conduction problem, from now on the IHCP, is a research field of great interest among the scientific and the engineering community (Beck et al., 1985; Alifanov, 1994; Ozisik, 2000) due to its vast range of applications, including the estimation of thermophysical properties of a material (Huntul y Lesnic, 2017; Farahani y Kisomi, 2020); the estimation of Neumann and/or Robin boundary conditions (Mohebbi et al., 2019; Abdelhamid et al., 2018; Samadi et al., 2012; Nejad et al., 2010) and/or initial conditions (Liu y Chang, 2015; Wen et al., 2013); the specification of heat sources (Lu et al., 2019; Zueco et al., 2006); among many other examples. To give a better understanding of the essentials of the IHCP, we distinguish between the so-called forward or direct problems, and the inverse problems. The former is the usual formulation of the heat transfer problem, where a cause-effect relationship is established. An example is the calculation of the temperature field in a body when the initial and boundary conditions are perfectly defined. This kind of problem meets all the three Hadamard's conditions (Mueller y Siltanen, 2012): 1) the solution exists, 2) the solution is unique, and 3) the solution is stable, meaning that it depends continuously on the data. In other words, it is said that the problem is well-posed. On the other hand, in the inverse problem the cause-effect relationship defined earlier is altered. In this sense, the solution of the inverse problem consists in finding the causes giving rise to certain effects in the domain of interest. This problem is ill-posed due to its extreme sensitivity with noise in the input data, whereby the last Hadamard's condition is not fulfilled.

In order to overcome the previously described intrinsic feature of the inverse problems, a regularization procedure must be applied. The algorithmic implementation of such technique depends on the inverse computation method. It is usual to classify the available numerical methods that deal with the inverse problem into two main groups depending on the way the unknowns are computed, namely the *whole domain* and *sequential* methods (Beck et al., 1985; Ozisik, 2000). In the former, the unknowns are obtained simultaneously, all at once, meaning that the data to be used in the inverse estimation must be available throughout the entire transient analysis. In the latter, the unknowns are computed sequentially at each time step using the information available until that time, and also some future time information.

One way to accomplish the regularization strategy in linear inverse problems formulated through a whole domain approach is by variational methods (Vogel, 2002), which consists in the minimization of an objective functional modified by a penalty term. The former is usually a least-squares functional of the misfit between an input data and the output of a linear model, whereas the latter is typically an squared  $\ell_2$ -norm of the unknowns. The most representative example is the normal equations with Tikhonov regularization (Beck et al., 1985; Duda, 2017), although other general gradient and non-gradient optimization methods (Colaço et al., 2006; Hao y Reinhardt, 1998) can be mentioned. Another strategies to accomplish the regularization when using a whole domain approach are the filtering methods such as the SVD and TSVD (Mueller y Siltanen, 2012; Vogel, 2002); and iterative methods, such as the conjugate gradient method with or without adjoint formulation (Alifanov, 1994; Colaço y Orlande, 1999), the Levenberg-Marquardt method (Ozisik,

2000; Duda, 2016), among others. In contrast, the regularization in the sequential specification methods is conducted via the concept of the future time data (Beck et al., 1985; Lamm, 1995). The most representative algorithm is the original Beck's sequential function specification method (SFSM) (Beck et al., 1985) and its many variants and numerical implementations, such as the filter approach of the SFSM (Beck, 2008; Beck y Woodbury, 2016), the sequential conjugate gradient (Dowding y Beck, 1999), the SVD formulation (Cabeza et al., 2005), among others.

When studying linear inverse problems that arise in other research fields (Mueller y Siltanen, 2012; Aster et al., 2018) such as in image processing, it is clear that other stabilization strategies are also common. Although the classical Tikhonov regularization provides stable solutions, the so-achieved results tend to be over-smoothed. Such a feature is detrimental in cases where a blurry and/or noisy image must be reconstructed because the target is not only to recover its main features, but also to preserve the edges of the image. In order to overcome such a difficulty, a total variation (TV) regularization strategy based on the  $\ell_1$ -norm of the first derivative of the unknown quantity has been proposed by Rudin et al. (1992). This alternative approach is known to be *edge preserving*, whereby the solution obtained from noisy data will also involve an appropriate reconstruction of sharp boundaries.

To the authors' best knowledge, the aforementioned regularization strategies have not yet been implemented for estimating surface heat fluxes in the framework of a linear whole domain IHCP, even when such procedures would allow the improved reconstruction of unknown quantities of interest. Very few related works can be mentioned. In the work of Lu et al. (2019), an  $\ell_1$  regularization strategy was used appropriately to recover the information of sparse heat sources in a two-dimensional domain. In (Baranger et al., 2014), a Cauchy problem inherent in the heat conduction equation is solved using an energy-like method-based optimization process, coupled to a TV regularization in order to handle the noisy data. In (Zhang y Ng, 2019), the authors deals with two IHCPs, one modeled through a Volterra- and the other using a Fredholm-like integral equations. To find the solution to these inverse problem, the alternating direction method of multipliers (ADMM) is employed, being the objective function a coupling between a  $\ell_\infty$ -norm of the data fitting term together with a TV-norm of the unknowns. In (Li y Deng, 2020) a TV regularization procedure has been used in the solution of an inverse problem to estimate the unknown diffusion coefficient in a parabolic equation.

In agreement with the recent developments and potentialities inherent in the TV regularization strategy (Rudin et al., 1992; Rodríguez, 2013; Chan et al., 2000), we propose the implementation of such a procedure in the solution of a linear IHCP conceived to estimate surface heat fluxes in the framework of a variational whole domain inverse method. Accordingly, the introduction of a TV-norm of the unknown heat fluxes will be presented as a suitable alternative to the classical penalty term based on a squared  $\ell_2$ -norm. This choice leads to the commonly known  $\ell_2$ -TV problem (Rodríguez, 2013), since the functional to minimize is composed by a coupling between a  $\ell_2$ -norm of the misfit term and a TV-norm of the unknowns. After defining mathematically the TV-norm, we will present three specially designed solution strategies that are common in the image processing field, such as the lagged diffusivity fixed point iteration (LDFPI), the iteratively reweighted least-squares (IRLS), and the split Bregman iteration (SBI) methods, which will be adapted to the IHCP considered in this communication. In order to analyze the performance of the proposed

strategy, we will compare the obtained results with those achieved via the Tikhonov model. Briefly, this is the first study focused on discussing the potentialities of using a TV regularization strategy to deal with the ill-posedness of the linear IHCP of estimating transient surface heat fluxes, providing suitable numerical methods specially adapted to accomplish a prescribed task.

The remainder of this work is organized as follows: Section 2 is devoted to present the formulation of the inverse problem, the corresponding finite element-based formulation, the definition of the objective function and the sensitivity analysis; Section 3 presents the formulation of the inverse problems with a TV penalization term, and the algorithms that will be employed; Section 4 describes the one dimensional problem addressed in this communication with one sensor and one unknown boundary heat flux, together with the obtained main results. The discussion of such outcomes is addressed in Section 5; and finally, conclusions are drawn in Section 6.

## 2. Formulation of the inverse problem

### 2.1. Governing equations

Let us consider an infinitely long plate of thickness  $L$ . Its right boundary is isolated, while an unknown transient heat flux  $q(t)$  acts at the left boundary. The thermophysical properties of the body, namely the conductivity  $k$ , specific heat  $C_p$ , and density  $\rho$ , are constant. The initial condition, that is to say, the temperature at the beginning of the analysis, is  $T_0$ . Fig. B.1a depicts the main features of the geometry. Such features allow the solution of the resulting transient heat conduction problem in a one-dimensional domain. The mathematical model that establishes a relationship between the temperature field throughout the body and the recently described features is the so-called Initial and Boundary Value Problem (IBVP) (B.1), which is given by the transient heat conduction equation (B.1a) (no internal heat sources are considered), the initial or Cauchy condition (B.1b), and the boundary conditions (B.1c) and (B.1d),

$$\rho C_p \frac{\partial T(x, t)}{\partial t} = k \frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2}, \quad 0 \leq x \leq L, \quad t > 0 \quad (\text{B.1a})$$

$$T(x, t)|_{t_0} = T_0(x), \quad 0 \leq x \leq L, \quad t = 0 \quad (\text{B.1b})$$

$$k \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} = q_l = q(t), \quad x = 0, \quad t > 0, \quad (q(t) \text{ unknown}), \quad (\text{B.1c})$$

$$-k \frac{\partial T(x, t)}{\partial x} = q_r = 0, \quad x = L, \quad t > 0, \quad (\text{B.1d})$$

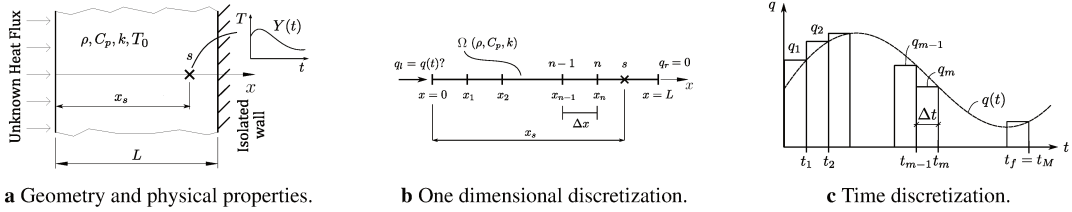
where  $T(x, t)$  is the temperature at position  $x$  and time  $t$ . The missing information regarding the unknown boundary condition (equation (B.1c)) must be remediated to complete the formulation of the problem. Therefore, a temperature-time history  $Y(t)$  at certain position  $x_s$ , which corresponds to a sensor point  $s$  in the body  $\Omega$ , is provided. Such sensor point actually represents the location where a thermo-couple is positioned within the body in a controlled transient heat conduction experiment.

The IHCP to be addressed in this communication consists in finding a surface heat flux history  $q(t)$  at  $x = 0$  such that  $T(x_s, t) - Y(t) \approx 0$  for  $t \geq 0$ , which means that the temperature  $T(x, t)$  computed by the inverse model at the sensor location must match as well as possible the provided temperature-time

history  $Y(t)$ . This outcome is monitored by defining an appropriate error measurement and a stopping criterion, which are concepts that will be discussed later in this communication. The problem of estimating the unknown heat flux  $q(t)$  using the information of the available temperature-time history  $Y(t)$  within the body as input data is ill-posed (Beck et al., 1985; Ozisik, 2000; Alifanov, 1994). This feature is related to its extreme sensitivity of the estimated values to errors in the input data. We will focus on the stability of the problem since the uniqueness and existence of the solution are assumed to be met in this work.

## 2.2. Finite element implementation

The finite element method (FEM)-based solution of the recently described transient heat conduction problem will be conducted under the standard centered Bubnov-Galerkin weak-form of the governing equations, and the domain will be subdivided using  $N$  nodes, i.e.  $N - 1$  elements. We consider that the nodes are equally spaced, so all the elements have the same length  $\Delta x$ . Fig. B.1b shows the discretized domain and the physical properties defined earlier.



**Figure B.1:** Considered domain and its main features of the inverse heat conduction problem.

The temperature field in  $\Omega$  is approximated as  $T(x, t) = \mathbf{N}(x) \cdot \mathbf{T}(t)$  for all  $x \in \Omega$ , where  $\mathbf{N}$  is the vector of shape functions associated to every node of the finite elements mesh and  $\mathbf{T}$  is the vector nodal temperatures (unknown). After some mathematical manipulations, the set of equations (B.1) is transformed into equation (B.2) using a fully implicit backward Euler time-integration scheme,

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

where  $(*)^{m\Delta t}$  is  $(*)$  at time  $t_m = m\Delta t$  with  $m = 1, 2, \dots, M$ ,  $\Delta t$  is the constant time step,  $\mathbf{C}$  is the capacitance matrix,  $\mathbf{K}$  is the conduction matrix, and  $\mathbf{Q}^{m\Delta t}$  is the thermal loads vector, given by

$$\begin{aligned} \mathbf{C} &= \rho C_p \int_0^L \mathbf{N}^T \mathbf{N} dx, \\ \mathbf{K} &= k \int_0^L \nabla \mathbf{N}^T \nabla \mathbf{N} dx, \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

$$\mathbf{Q}^{m\Delta t} \equiv \mathbf{Q}(t_m) = -q_m [\mathbf{N}(0)]^T.$$

where  $q_m \equiv q(t_m)$ . The functional form of the heat flow  $q(t)$  to be estimated is approximated via the piecewise constant function depicted in Fig. B.1c, where the time interval inherent in the transient analysis is divided into  $M$  uniform sub-intervals.

The transient temperature field  $T(x, t)$  throughout the body is obtained sequentially at every time step from equation (B.2), starting at  $t = 0$  with the discrete initial temperature vector  $\mathbf{T}^0$  defined from the

continuous distribution stated in equation (B.1b), by solving (B.2) for  $\mathbf{T}^{m\Delta t}$ . Note that equation (B.2) cannot be solved before determining the unknown heat fluxes  $q_m$ . The next sections are devoted to describe the methodology for computing these unknowns.

### 2.3. Objective function

Following the so-called variational approach in the context of the IHCP (Vogel, 2002), we define an objective function based on a least-squares criterion given by

$$S(\mathbf{q}) = \|\mathbf{Y} - \Theta(\mathbf{q})\|^2 + \alpha R(\mathbf{q}). \quad (\text{B.4})$$

where  $\Theta(\mathbf{q}) = [T(x_s, t_1; q_1), T(x_s, t_2; q_2), \dots, T(x_s, t_M; q_M)]^T$  is the vector of computed temperatures via the FEM at the sensor location  $x_s$  for the time instants  $t_1, t_2, \dots, t_M$ ,  $\alpha$  is a regularization parameter and  $R(\mathbf{q})$  is a regularizing functional. The first term in the right hand side (RHS) of equation (B.4) represents the misfit between the given temperature history  $Y(t_m)$  and the discrete temperatures  $\Theta(q_m)$ , computed in terms of the set of parameters stored in the  $\mathbf{q}$  vector, which are obtained after each iteration of the solution algorithm. Both  $\mathbf{Y}$  and  $\Theta(\mathbf{q})$  are vectors in  $\mathbb{R}^M$ . The second term in the RHS of equation (B.4) is a penalty-based regularization term that is essential due to the ill-posedness of the inverse problem (Beck et al., 1985; Ozisik, 2000), transforming it into conditionally well-posed (Alifanov, 1994).

A classical approach in the solution of IHCP involves the implementation of a Tikhonov regularizing functional, which can be expressed as  $R(\mathbf{q}) = \|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2$ . Such a functional is the  $\ell_2$ -norm of the product  $\mathbf{L}\mathbf{q}$  and it can be interpreted as a quadratic constraint for the problem of minimizing  $\|\mathbf{Y} - \Theta(\mathbf{q})\|^2$ . The discretization matrix  $\mathbf{L}$  allows the implementation of the zeroth-, first-, or second-order Tikhonov regularization (Ozisik, 2000), according to the derivative order of the unknowns. For the zeroth-order variant,  $\mathbf{L} = \mathbf{I}$ .

The value of the parameter  $\alpha$  modulates the influence of the regularization term in the objective function. Large values of  $\alpha$  lead to markedly damped solutions, whereas small values of such a modulating parameter give rise to oscillatory and unstable solutions tending to fit the noise of the input data. In this sense, the appropriate choice of the optimum value for  $\alpha$  for the achievement of an appropriate solution of the IHCP will be addressed in Section 2.6.

Finally, the variational approach consists in finding the solution to the IHCP through the set of values  $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha$  that minimize the expression (B.4), with  $R(\mathbf{q}) = \|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2$ , which is

$$\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \arg \min_{\mathbf{q} \in \mathbb{R}^M} \{ \|\mathbf{Y} - \Theta(\mathbf{q})\|^2 + \alpha \|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2 \}. \quad (\text{B.5})$$

### 2.4. Sensitivity analysis

The sensitivity or Jacobian matrix  $\mathbf{J}$  is the tangent operator that links the variations of temperature with changes in the vector of unknown transient heat flux. It arises during the sensitivity analysis when

evaluating the gradient of the objective function  $S_\alpha$  given by equation (B.4) with  $R(\mathbf{q}) = \|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2$ , i.e.

$$\nabla S_\alpha = \frac{dS_\alpha}{d\mathbf{q}} = -2\mathbf{J}^T[\mathbf{Y} - \Theta(\mathbf{q})] + 2\alpha\mathbf{L}\mathbf{q}, \quad (\text{B.6})$$

where  $\mathbf{J} = d\Theta/d\mathbf{q}$  is the Jacobian matrix. Let the sensor be located at the node  $s$  of the finite element mesh, so  $\Theta(q_m)$  is given by the  $s$ -th component of the nodal temperature vector  $\mathbf{T}^{m\Delta t}$ . Then,  $\mathbf{J}$  is completely determined by knowing  $d\mathbf{T}^{m\Delta t}/d\mathbf{q}$  (and taking into account equation (B.2)), as

$$\frac{d\mathbf{T}^{m\Delta t}}{d\mathbf{q}} = \left( \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} + \mathbf{K} \right)^{-1} \left[ \frac{\mathbf{C}}{\Delta t} \frac{d\mathbf{T}^{(m-1)\Delta t}}{d\mathbf{q}} - \frac{d\mathbf{Q}^{m\Delta t}}{d\mathbf{q}} \right] = \frac{\partial \mathbf{T}^{m\Delta t}}{\partial \mathbf{Q}^{l\Delta t}} \frac{d\mathbf{Q}^{l\Delta t}}{d\mathbf{q}}, \quad (\text{B.7})$$

where it can be seen that the derivatives of the temperature with respect to the vector of design variables can be obtained using the chain rule. The process is performed sequentially starting from  $m = 1$  with  $d\mathbf{T}^0/d\mathbf{q} = \mathbf{0}$ , since the temperature field at  $t = 0$  is prescribed. From equation (B.1c),  $d\mathbf{Q}^{l\Delta t}/dq_m = \mathbf{0}$  if  $l \neq m$ , whereas  $d\mathbf{Q}^{l\Delta t}/dq_m = \mathbf{N}^T$  if  $l = m$ . It can be observed that  $\partial \mathbf{T}^{m\Delta t}/\partial \mathbf{Q}^{k\Delta t} = \mathbf{0}$  when  $k > m$ , since the temperature field at a certain time instant does not depend on future heat fluxes. Another noteworthy aspect is that  $d\mathbf{T}^{m\Delta t}/d\mathbf{q}$  is the expression for the sensitivity coefficients valid for any node of the spatial mesh. Whereby, the computation of  $d\Theta/d\mathbf{q}$  is intrinsic in such derivation.

In agreement with Beck et al. (1985), the sensitivity matrix exhibits a lower triangular shape and its elements along a diagonal take the same value for all the diagonal. Such matrix is a discrete version of the first-kind Volterra linear integral operator (Lamm, 1995) which is present in the derivation of the inverse model proposed by Beck in terms of the Duhamel's superposition principle. Further details regarding such formulation can be found in Beck et al. (1985).

The derivation of the explicit form of  $\mathbf{J}$  allows to write the transient temperature distribution  $\Theta$  at the sensor location as  $\Theta = \mathbf{J}\mathbf{q} + T_0\mathbf{1}$ , which constitutes a linear model for such temperature distribution with respect to  $\mathbf{q}$ .

## 2.5. Typical solution strategy for the linear inverse model

In the previous subsection we found that, in the framework of the finite element model for the IHCP, an analytical expression for the sensitivity coefficients of the matrix  $\mathbf{J}$  can be drawn. So, the substitution of the linear model  $\Theta = \mathbf{J}\mathbf{q} + T_0\mathbf{1}$  in (B.4), with  $R(\mathbf{q}) = \|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2$ , leads to:

$$S_\alpha(\mathbf{q}) = \|\mathbf{Y} - (T_0\mathbf{1} + \mathbf{J}\mathbf{q})\|^2 + \alpha\|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2 = \|\mathbf{Y}^* - \mathbf{J}\mathbf{q}\|^2 + \alpha\|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2 \quad (\text{B.8})$$

being  $\mathbf{Y}^* = \mathbf{Y} - T_0\mathbf{1}$ . We can see that this last equation is identical to the usual formulation of an inverse problem  $S_\alpha(u) = \|b - \mathcal{A}u\|^2 + \alpha R(u)$  where  $b$  is a continuous input noisy measured data,  $u$  is the variable to be estimated, and  $\mathcal{A}$  is a compact integral linear operator involving a convolution of functions, which leads to Fredholm- or Volterra-like integral operators (Mueller y Siltanen, 2012; Vogel, 2002; Alifanov,

1994). The minimization of the modified objective function (B.8) leads to the solution  $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha$  by computing

$$\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \arg \min_{\mathbf{q} \in \mathbb{R}^M} \{ \|\mathbf{Y}^* - \mathbf{J}\mathbf{q}\|^2 + \alpha \|\mathbf{L}\mathbf{q}\|^2 \}. \quad (\text{B.9})$$

Such problem can be solved resorting to the alternative form of the Tikhonov formulation (Duda, 2017; Hansen, 1999; Lamm, 1995), which is based on the following *normal equations* for the inverse problem:  $(\mathbf{J}^T\mathbf{J} + \alpha\mathbf{L}^T\mathbf{L})\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \mathbf{J}^T\mathbf{Y}^*$ , whose solution can be expressed as

$$\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \mathbf{J}_\alpha^* \mathbf{Y}^*, \quad \text{being} \quad \mathbf{J}_\alpha^* = (\mathbf{J}^T\mathbf{J} + \alpha^2\mathbf{L}^T\mathbf{L})^{-1}\mathbf{J}^T. \quad (\text{B.10})$$

## 2.6. Selection of the regularization parameter $\alpha$

Among the most popular methods available to properly select the optimum value for  $\alpha$ , we can mention the unbiased predictive risk estimator method, the discrepancy principle, the generalized cross-validation, and the L-curve criterion (Mueller y Siltanen, 2012; Vogel, 2002). Other more recently developed strategies involve a set of regularization terms in the objective function, which implies the appropriate selection of multiple regularization parameters. Such schemes impose the need for special algorithms to find optimality in each one of such parameters. Many examples are available in the image/signal processing fields (Yang et al., 2021; Song et al., 2015). On the other hand, the clearest example of this multi-parameter regularization for the IHCP is developed by Samadi et al. (2021), which involves the combination of zeroth-, first-, and second-order Tikhonov regularization terms to the sum of squared errors function. The solution to this multivariate optimization problem is computed via genetic algorithms and pattern search techniques.

Despite the capability of the multi-parameter regularization strategies in improving the quality of the solution to the inverse problem, the complexity of the solution procedures and the computational cost are also increased. On the other hand, the current work is focused on appropriate implementation of the traditional L-curve criterion approach due to both its more simple implementation and its suitability and reliability in the selection of the regularization parameter, which are aspects that have been extensively demonstrated and discussed in the literature (Hansen, 1992, 1999). The method essentially consists in locating a set of parametrically generated points given by  $\{\log\|\mathbf{Y}^* - \mathbf{J}\mathbf{q}_\alpha\|_2, \log\|\mathbf{L}\mathbf{q}_\alpha\|_2\}$ , in a two-dimensional graph. This plot is usually an L-shaped curve, and the optimum value of the regularization parameter is placed at the corner of the curve.

## 3. The $\ell_2$ -TV problem

### 3.1. Formulation of the problem

So far, we have presented a typical whole domain approach to estimate an unknown transient heat flux using an inverse zeroth-order Tikhonov strategy to stabilize the problem. Alternatively, in this communication we propose to replace the Tikhonov term in (B.8) by a TV penalty term defined as  $\|\mathbf{q}\|_{\text{TV}} \equiv \text{TV}(\mathbf{q})$ ,



leading to the final form of the modified TV-based objective function

$$S_\alpha(\mathbf{q}) = \|\mathbf{Y}^* - \mathbf{J}\mathbf{q}\|^2 + \alpha \text{TV}(\mathbf{q}). \quad (\text{B.11})$$

Such inverse formulation constitutes a  $\ell_2$ -TV problem (Rodríguez, 2013) commonly known as the ROF model, which has been introduced in the pioneer work of Rudin et al. (1992).

For a real-valued function  $f$  on an interval  $[a, b]$ , its total variation  $\text{TV}(f)$  is defined as  $\text{TV}(f) = \sup \sum_{i=1}^k |f(x_i) - f(x_{i-1})|$ , where  $\sup$  stands for the *supremum* over all partitions  $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_k = b$  of  $[a, b]$ . Furthermore, if  $f$  is differentiable in the mentioned interval, the above expression turns into  $\text{TV}(f) = \int_a^b |df/dx| dx$ . The non differentiability of  $|df/dx|$  in the TV integral at  $t = 0$  will be avoided resorting to the smooth approximation  $|z| = \sqrt{z^2 + \beta}$  Vogel y Oman (1998); Vogel (2002), where  $\beta$  is a small positive number controlling the grade of differentiability ( $\beta = 1.0e-5$  is small enough for such a purpose). Using such a TV regularization term will allow the appropriate capture of jump discontinuities in the unknown function, which is not possible to achieve using a classical Tikhonov regularization due to its over-smoothness features.

### 3.2. Discrete implementation of the TV term

Since in our analysis the continuous function  $q(t)$  is represented by a discrete set of values  $q_1, q_2, \dots, q_m, \dots, q_M$  which are stored in the vector  $\mathbf{q}$ , we need to find an expression for  $\text{TV}(\mathbf{q})$ . The discrete approximation of  $|dq/dt|^2$  at  $t = t_m$  is given by  $[q_m - q_{m-1}]^2 / \Delta t^2$ , where we employ a forward differences scheme to approximate the time derivative. Hence, the discrete form of the TV functional can be expressed as  $\text{TV}(\mathbf{q}) = \sum_{m=2}^M \sqrt{\{[q_m - q_{m-1}] / \Delta t\}^2 + \beta} \Delta t$ . Then, we introduce the matrix-vector product  $\mathbf{D}\mathbf{q}$  which leads to the final expression of  $\text{TV}(\mathbf{q})$ ,

$$\text{TV}(\mathbf{q}) = \sum_{m=1}^{M-1} \sqrt{(\mathbf{D}\mathbf{q})_m^2 + \beta} \Delta t, \quad (\text{B.12})$$

$$\mathbf{D} = \frac{1}{\Delta t} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(M-1) \times M}.$$

The scalar operations over  $\mathbf{D}\mathbf{q}$  are considered to be applied element-wise, and  $\mathbf{D}$  is a discretization matrix that allows the computation of the finite differences  $(q_m - q_{m-1}) / \Delta t$ . Then, the gradient of the discrete form of the TV functional can be computed as

$$\nabla \text{TV}(\mathbf{q}) = \mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q})\mathbf{q} \in \mathbb{R}^{M-1}, \quad (\text{B.13})$$

$$\mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q}) = \mathbf{D}^T \left\{ \text{diag}_{m=1, \dots, M-1} [(\mathbf{D}\mathbf{q})_m^2 + \beta]^{-1/2} \right\} \mathbf{D} \Delta t,$$

where  $\mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q})$  is the expression originally derived by Vogel (2002), which has the property of being a symmetric  $(M-1) \times (M-1)$  matrix.

### 3.3. Solution strategies for the $\ell_2$ -TV problem

In this section we show different available methods that can be used to estimate the transient unknown heat flux in the context of the  $\ell_2$ -TV formulation. Although most of the literature about the TV regularization is related to the field of signal processing and image reconstruction, we will show that these concepts could also be applied to the case of the inverse heat conduction problems formulated for the estimation of time-dependent surface heat fluxes.

#### The lagged diffusivity fixed point iteration method

The presence of an  $\ell_1$ -norm in the TV formulation makes difficult the achievement of a solution to the optimization problem, in contrast with the typical Tikhonov regularization scheme where the whole minimization functional is quadratic. After defining the general linear inverse problem  $S_\alpha(u) = \|b - \mathcal{A}u\|^2 + \alpha R(u)$ , with  $R(u) = \text{TV}(u)$  and the differentiable approximation of  $|\nabla u|$ , the authors in Rudin et al. (1992) presented the formulation of the Euler-Lagrange equations for the aforementioned  $S_\alpha(u)$  functional as  $0 = \mathcal{A}^*(b - \mathcal{A}u) + \alpha \nabla \cdot (\nabla u / \sqrt{|u|^2 + \beta})$ , where  $\mathcal{A}^*$  stands for the adjoint operator of  $\mathcal{A}$ . The marked non-linearity of  $\nabla \cdot (\nabla u / \sqrt{|u|^2 + \beta})$  impose the need of finding suitable strategies to find a stable solution to the Euler-Lagrange equation. In the pioneer work of Rudin et al. (1992), the authors proposed a time marching scheme to reach the steady state of the parabolic equation given by  $\partial u / \partial t = -\mathcal{A}^*(b - \mathcal{A}u) - \alpha \nabla \cdot (\nabla u / \sqrt{|u|^2 + \beta})$  with initial condition  $u(x, 0) = b$ . Alternatively, Vogel y Oman (1998) proposed a fixed point iteration method for the Euler-Lagrange equation defined as  $0 = \mathcal{A}^*(b - \mathcal{A}u^{k+1}) + \alpha \nabla \cdot (\nabla u^{k+1} / \sqrt{|u^k|^2 + \beta})$ , which is also known as the lagged diffusivity fixed point iteration (LDFPI) method, because the diffusivity term in the resulting parabolic equation is computed using a previous value of  $u$ . The algorithmic implementation of the LDFPI method is stated in Algorithm 1.

Other iterative methods can be found in the book of Vogel (2002). The steepest descent method is posed as a generalization of the time marching scheme. The direction of descent in the former is tuned by a parameter  $\nu_k$  obtained using a line search algorithm, whereas such parameter is kept fixed as  $\nu = \Delta t$  in the latter approach. The aforementioned methods, including the time marching method, are known to be at most linearly convergent (Chan et al., 1999; Vogel, 2002). Other iterative methods that, under certain assumptions, can reach quadratic convergence are the Newton method and primal-dual methods (Chan et al., 1999; Vogel, 2002).

Many other strategies, not involving the Euler-Lagrange equation as in the previous cases were proposed (Rodríguez, 2013). In the following sections, we will focus on two strategies whose easy implementation and reliability in the solution of inverse problems involving  $\ell_1$ -norms have been extensively demonstrated (Rodríguez, 2013; Goldstein y Osher, 2009; Gholami y Hosseini, 2013). Such strategies are the iteratively reweighted least-squares (IRLS) method, and the split Bregman iteration (SBI) algorithm.

#### The iteratively reweighted least-squares (IRLS) method

IRLS algorithms are conceived to solve the  $\ell_2$ -TV inverse problem given by equation (B.11) via the approximation of the  $\ell_1$ -norm of the TV term by a weighted  $\ell_2$ -norm, within an iterative scheme (Rodríguez,

2013; Wohlberg y Rodríguez, 2007). This algorithm can also deal with a more general formulation, where the objective function is composed by the sum of the  $\ell_p$ -norm of the data fidelity term and the  $\ell_q$ -norm of the regularization term. However, in our case we will focus on the  $\ell_2$ -TV problem. The solution strategy of the IRLS method, clearly stated in Gholami y Hosseini (2013) and Rodríguez (2013), is summarized in Algorithm 2.

### The split Bregman iteration (SBI) method

The split Bregman iteration algorithm has gained very much attention in the past few years in the image processing field because of its ability to find the solution of optimization problems where the objective function is composed by a coupling between a  $\ell_2$  and a  $\ell_1$  terms, as in the case of a  $\ell_2$ -TV problem (Rodríguez, 2013). Among its main advantages (Goldstein y Osher, 2009; Liu y Huang, 2010) we can mention its robustness against noisy data, its fast convergence, and its direct and straightforward implementation. Such a procedure is actually a re-interpretation of the alternating direction method of multipliers (ADMM) that is specially adapted to problems involving  $\ell_1$ -norms (Rodríguez, 2013; Goldstein y Osher, 2009).

The method was originally proposed by Goldstein y Osher (2009), inspired by previous works (Wang et al., 2007; Yin et al., 2008). The authors defined a constrained optimization problem where the objective function is composed by a coupling between a  $\ell_2$  and a  $\ell_1$  terms as  $\|d\|_1 + H(u)$ , being  $H(u) = \frac{\alpha}{2} \|b - \mathcal{A}u\|_2^2$  the conventional data fidelity term. The minimization problem is subject to the constraint  $d = \nabla u = Du$ , and is solved with respect to the variables  $u$  and  $d$ . Then, they converted the constrained formulation into an unconstrained one by adding a penalization term to the objective function as  $\|d\|_1 + H(u) + \frac{\lambda}{2} \|d - Du\|_2^2$ . After some mathematical manipulations, whose details we omit for the seek of clarity but they can be further reviewed in Goldstein y Osher (2009), the solution to this problem is obtained iteratively as

$$(u^{k+1}, d^{k+1}) = \arg \min_{u,d} \|d\|_1 + H(u) + \frac{\lambda}{2} \|d - Du\|_2^2, \quad b^{k+1} = b^k + (Du^{k+1} - d^{k+1}).$$

The main problem given by the equation on the left in the above set is split into two sub-problems, one that is solved for  $u$  and the another that is solved for  $d$ . Starting with  $u^0 = 0$  and  $d^0 = b^0 = 0$ , the expression for the split Bregman iterative algorithm is completed making

$$\begin{aligned} u^{k+1} &= \arg \min_u \frac{\alpha}{2} \|b - \mathcal{A}u\|_2^2 + \frac{\lambda}{2} \|Du - d^k + b^k\|_2^2, \\ d^{k+1} &= \arg \min_d \|d\|_1 + \frac{\lambda}{2} \|d - Du^{k+1} + b^k\|_2^2. \end{aligned}$$

The decoupled problems can be solved as follows. The first sub-problem involves only  $\ell_2$ -norms, so the optimality condition implies making the gradient of its corresponding objective functional equal to zero, and then solving for  $u^{k+1}$ . After some mathematical manipulation, the expression can be stated as  $u^{k+1} = (\alpha \mathcal{A}^* \mathcal{A} + \lambda \mathcal{D}^* \mathcal{D})^{-1} [\alpha \mathcal{A}^* b + \lambda \mathcal{D}^* (d^k + b^k)]$ .

The solution for the second sub-problem can be obtained explicitly (Goldstein y Osher, 2009) with  $d^{k+1} = \text{shrink}(Du^{k+1} + b^k, 1/\lambda)$ , where the shrinkage operator is defined as  $\text{shrink}(x, \gamma) = \frac{x}{|x|} \max(|x| - \gamma, 0)$ , and the parameter  $\lambda$  is arbitrarily chosen. However, since the algorithm is expected to converge within

a few number of iterations, an outer loop can be implemented where different values of  $\lambda \rightarrow \infty$  are passed to the main algorithm. In this work we will follow the recommendation stated in Gilles (2011), making  $\lambda = 1$ .

It is worth to note that the recently described algorithm is valid for a  $\ell_1$ -norm of  $d$ , whose discrete implementation is  $\mathbf{d} = \sum_i (\mathbf{D}\mathbf{q})_i$ . For the case of the TV norm of  $d$ , its discrete implementation is given by equation (B.12). Hence, the computation of the first order derivative corresponding to the optimality condition can be written as follows

$$\alpha \mathbf{J}^T (\mathbf{J}\mathbf{q} - \mathbf{Y}^*) + \lambda \frac{d\text{TV}}{d\mathbf{q}} (\text{TV}(\mathbf{q}) - d^k + b^k) = 0,$$

where  $d\text{TV}/d\mathbf{q} = \mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q})\mathbf{q}$  as in equation (B.13). From the previous expression, it can be seen that  $\mathbf{q}^{k+1}$  cannot be computed directly since the equation is nonlinear. However, we propose an alternative that consists in using an approach similar to the LDFPI method described earlier. It consists in computing the expressions depending on  $\mathbf{q}$  (the  $\mathbf{L}_{\text{TV}}$  and TV expressions) in terms of the value of  $\mathbf{q}$  obtained in the previous iteration, i.e.  $\alpha \mathbf{J}^T \mathbf{J}\mathbf{q}^{k+1} - \alpha \mathbf{J}^T \mathbf{Y}^* + \lambda \mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q}^k)\mathbf{q}^{k+1} (\text{TV}(\mathbf{q}^k) - d^k + b^k) = 0$ . Therefore, the updated  $\mathbf{q}^{k+1}$  vector and the updated state of the variables  $d$  and  $b$  are computed as follows

$$\mathbf{q}^{k+1} = [\alpha \mathbf{J}^T \mathbf{J} + \lambda \mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q}^k) (\text{TV}(\mathbf{q}^k) - d^k + b^k)]^{-1} (\alpha \mathbf{J}^T \mathbf{Y}^*), \quad (\text{B.14})$$

$$d^{k+1} = \text{shrink}(\text{TV}(\mathbf{q}^{k+1}) + b^k, 1/\lambda), \quad b^{k+1} = b^k + (\text{TV}(\mathbf{q}^{k+1}) - d^{k+1}). \quad (\text{B.15})$$

Using the previous definitions, and taking into account the discretized variables for our problem, the pseudo-code for the split Bregman iterative method is given in Algorithm 3.

Algorithm 1: LDFPI	Algorithm 2: IRLS	Algorithm 3: SBI
<b>Input:</b> $\mathbf{Y}^*$ , $\mathbf{J}$ , $\mathbf{L}_{\text{TV}}$ , $\alpha$	<b>Input:</b> $\mathbf{Y}^*$ , $\mathbf{J}$ , $\mathbf{D}$ , $\alpha$	<b>Input:</b> $\mathbf{Y}^*$ , $\mathbf{J}$ , $\mathbf{D}$ , $\alpha$ , $\lambda$
<b>Output:</b> $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha$	<b>Output:</b> $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha$	<b>Output:</b> $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha$
$k = 0$ , $\mathbf{q}^k = \mathbf{0}$ ,	$k = 0$ , $\mathbf{Q}_{\text{TV}}^0 = \mathbf{I}_n$ ,	$k = 0$ , $\mathbf{q}^k = \mathbf{0}$ , $d^k = b^k = 0$ ,
res = $\infty$ ,	$\mathbf{q}^k = \mathbf{0}$ , res = $\infty$ ,	res = $\infty$ ,
tol = a small number $< 1$	tol = a small number $< 1$	tol = small number $< 1$
<b>while</b> res $\geq$ tol <b>do</b>	<b>while</b> res $\geq$ tol <b>do</b>	<b>while</b> res $\geq$ tol <b>do</b>
$\mathbf{L}^k = \mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q}^k)$ $\nabla S^k =$ $2\mathbf{J}^T \mathbf{J} \mathbf{q}^k - 2\mathbf{J}^T \mathbf{Y}^* + \alpha \mathbf{L}^k \mathbf{q}^k$ $\mathbf{H}_k = 2\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \alpha \mathbf{L}^k$ $\mathbf{s}^k = -\mathbf{H}_k^{-1} \nabla S^k$ $\mathbf{q}^{k+1} = \mathbf{q}^k + \mathbf{s}^k$ res = $\ \mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k\ _2$ $k = k + 1$	$\mathbf{q}^{k+1} = (\mathbf{J}^T \mathbf{J} +$ $\frac{\alpha}{2} \mathbf{D}^T \mathbf{Q}_{\text{TV}}^k \mathbf{D})^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{Y}^*$ $\mathbf{Q}_{\text{TV}}^{k+1} =$ $\text{diag}_{m=1, \dots, M-1} [(\mathbf{D} \mathbf{q}^{k+1})_m^2 +$ $\beta]^{-\frac{1}{2}}$ res = $\ \mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k\ _2$ $k = k + 1$	$\mathbf{q}^{k+1} = [\alpha \mathbf{J}^T \mathbf{J} +$ $\lambda \mathbf{L}_{\text{TV}}(\mathbf{q}^k) (\text{TV}(\mathbf{q}^k) -$ $d^k + b^k)]^{-1} (\alpha \mathbf{J}^T \mathbf{Y}^*)$ $d^{k+1} = \text{shrink}(\text{TV}(\mathbf{q}^{k+1}) +$ $b^k, 1/\lambda)$ $b^{k+1} =$ $b^k + (\text{TV}(\mathbf{q}^{k+1}) + d^{k+1})$ res = $\ \mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k\ _2$ $k = k + 1$
<b>return</b> $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \mathbf{q}^k$	<b>return</b> $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \mathbf{q}^k$	<b>return</b> $\tilde{\mathbf{q}}_\alpha = \mathbf{q}^k$

### 3.4. Choosing the regularization parameter in the $\ell_2$ -TV problem

In this communication, the optimal regularization parameter will be found via the L-curve method, since it is also valid when a different norm is employed instead of a  $\ell_2$ -norm (Yang et al., 2015; Wen y Chan, 2011; Zhang y Ng, 2019). The parametric construction of the L-curve is made from the points  $\{\log(\text{TV}(\mathbf{q}_\alpha)), \log\|\mathbf{Y}^* - \mathbf{J}\mathbf{q}_\alpha\|_2\}$ , where  $\alpha$  is the varying parameter controlling the balance between the misfit and the TV terms. Moreover, such a parameter is kept constant in the course of the solution conducted under each algorithm. Other methods conceived to adaptively select the regularization parameter designed for the  $\ell_2$ -TV problem, such as the general cross-validation method (Liu y Liu, 2010) or the discrepancy principle (Wen y Chan, 2011), are not considered in this article.

The corner of the L-curve will be found by using the freely available package ‘‘Regularization Tools’’ provided by Hansen (1994), which is a set of computational tools for linear inverse problems. Such a tools package can be downloaded from the website <http://www2.compute.dtu.dk/~pcha/Regutools/>.

## 4. Numerical examples and results

The following numerical examples have been conducted in order to assess the performance of the proposed strategies, by using noisy input data sets for the estimation of the unknown boundary condition and measurement data from one single sensor. We consider a one-dimensional problem whose main features were already described in Section 2, and depicted in Fig. B.1a.

The test cases are defined by two computations: a forward run, followed by the inverse run. In the forward run, the temperatures in the whole body are calculated by FEM, using a prescribed transient heat

flux functional shape  $Q(t)$  acting at the left boundary. Two different prescribed heat fluxes are considered, which defines two test cases: *Test Case A* (a square-shaped heat flux function) and *Test Case B* (a half sine heat flux function). The upper and lower bounds on such functions are 0 and  $100 \text{ W/m}^2$  respectively, for both. A sensor  $s$  is placed at the isolated boundary ( $x_s = L$ ) to register the temperature-time history  $\mathbf{Y}$ , being this position the most hard condition for the inverse algorithm. In the inverse run, the cause (the heat flux) is estimated given the effect (the temperature  $\mathbf{Y}$  at the sensor location). The output of the inverse analysis will be  $q(t)$ . To mimic the presence of measurement errors in the registered temperatures, the exact values are affected by normally distributed random errors with zero mean and unit standard deviation. Thus, a perturbed input data with a noise level  $\epsilon$  is set as  $\mathbf{Y} + \epsilon \cdot \text{randn}(M)$ , where  $\text{randn}(M)$  is a vector of  $M$  normally distributed random real numbers, and  $\epsilon$  is the noise level. We will consider two values for this parameter, namely  $\epsilon = 0.01$  and  $\epsilon = 0.05$ , as it is usually the case.

The performance of the inverse computations is evaluated through an appropriate error measurement between the estimated and the exact heat flux, such as the root mean square error measurement defined as

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M [Q(t_m) - q(t_m)]^2}. \quad (\text{B.16})$$

The iterative process stops at the iteration  $k$  for which the norm of the changes between consecutive solutions  $\|\mathbf{q}^{k+1} - \mathbf{q}^k\|$  (see Algorithms 1-3) drops below a sufficiently small number, namely  $1e-3$ .

The thickness of the plate is  $L = 1 \text{ m}$ . The thermophysical properties of the body are  $k = 1 \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$  and  $\rho C_p = 10 \text{ J}/(\text{K} \cdot \text{m}^3)$ . The initial temperature is homogeneous throughout the body, with a value of  $1000^\circ \text{C}$ . The spatial discretization of the geometry is an equally spaced mesh with 20 finite elements. The temporal discretization for the inverse run is different from the one that is used in the forward run in order to avoid artificially perfectly fitted solutions as described by Mueller y Siltanen (2012), who refer to such issue as an *inverse crime*.

Table B.1 contains the error data for every solution algorithm and for the two levels of noise, attained in each Test Case. The last row of the table shows the results obtained using the classical Tikhonov model, which will be compared to the  $\ell_2$ -TV methods considered in this article. For this case, we only display the minimum error since we are interested only in the performance of the  $\ell_2$ -TV methods. The bolded written values correspond to the minimum error in each case.

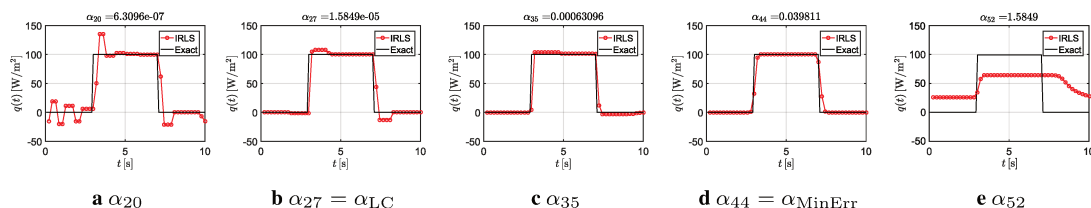
**Table B.1:** Error values according to the RMSE formula for Test Case A and B.

Method	Test Case A				Test Case B			
	$\epsilon = 0.01$		$\epsilon = 0.05$		$\epsilon = 0.01$		$\epsilon = 0.05$	
	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	L-curve ( $\alpha_{\text{LC}}$ )	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	L-curve ( $\alpha_{\text{LC}}$ )	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	L-curve ( $\alpha_{\text{LC}}$ )	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	L-curve ( $\alpha_{\text{LC}}$ )
LDFPI	8.0253	14.5120	8.2085	11.2601	3.8192	4.3309	5.5442	<b>6.8849</b>
IRLS	<b>8.0043</b>	<b>14.4420</b>	<b>8.1838</b>	<b>10.9280</b>	3.9347	<b>4.2176</b>	5.6527	6.9790
SBI	8.3382	14.4500	8.5427	13.2052	4.4682	5.7496	5.7471	7.6741
Tikhonov	11.8519	-	12.4033	-	<b>2.0460</b>	-	<b>2.3410</b>	-

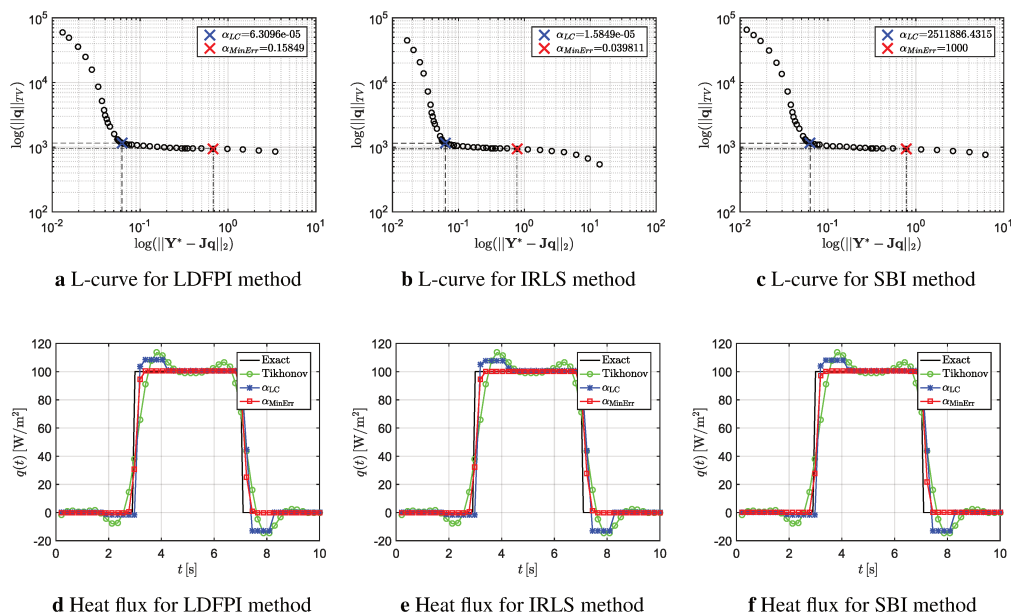
For the two Test Cases and for the two levels of noise, several plots of the set of points given parametrically by  $\{\log\|\mathbf{Y}^* - \mathbf{J}\mathbf{q}_\alpha\|_2, \log(\text{TV}(\mathbf{q}_\alpha))\}$  were constructed. These plots are shown in the first row of sub-figures from Fig. B.3-B.6, where it can be seen that the expected L-shaped curves are obtained. The corner where the curvature reaches a maximum is somewhat more clear in some plots than others. The above mentioned parametric search leads also to a set of errors computed by the RMSE formula. From this set, two values are recovered: the minimum value for the whole set, and the value corresponding to that obtained by the L-curve criterion. The corresponding values of the regularization parameter will be denoted as  $\alpha_{\text{MinErr}}$  and  $\alpha_{\text{LC}}$ , respectively. The optimum scenario is given when the previously mentioned values matches. However, such values do not always coincide as can be seen in the mentioned figures, but the criterion is still valid if they are relatively close to each other. Later, we will discuss this issues for every Test Case.

**Test Case A.** The reconstructions reached by the three methods are depicted in Fig. B.3d-B.3f for the noise level  $\epsilon = 0.01$ , whereas those corresponding to  $\epsilon = 0.05$  are shown in Fig. B.4d-B.4f. The minimum error values, those corresponding to  $\alpha_{\text{MinErr}}$ , reached using the LDFPI, the IRLS, and the SBI methods are all lower to that obtained using the Tikhonov method. This is an expected output since the original heat flux is piecewise constant with jump discontinuities that are over-smoothed by the Tikhonov model, whereas are properly captured by the TV regularization-based procedures. The minimum error values achieved for the three methods studied in this communication are actually quite similar for the two noise levels, suggesting that all three methods are equally able to properly reconstruct the prescribed heat flux, regardless the noise level.

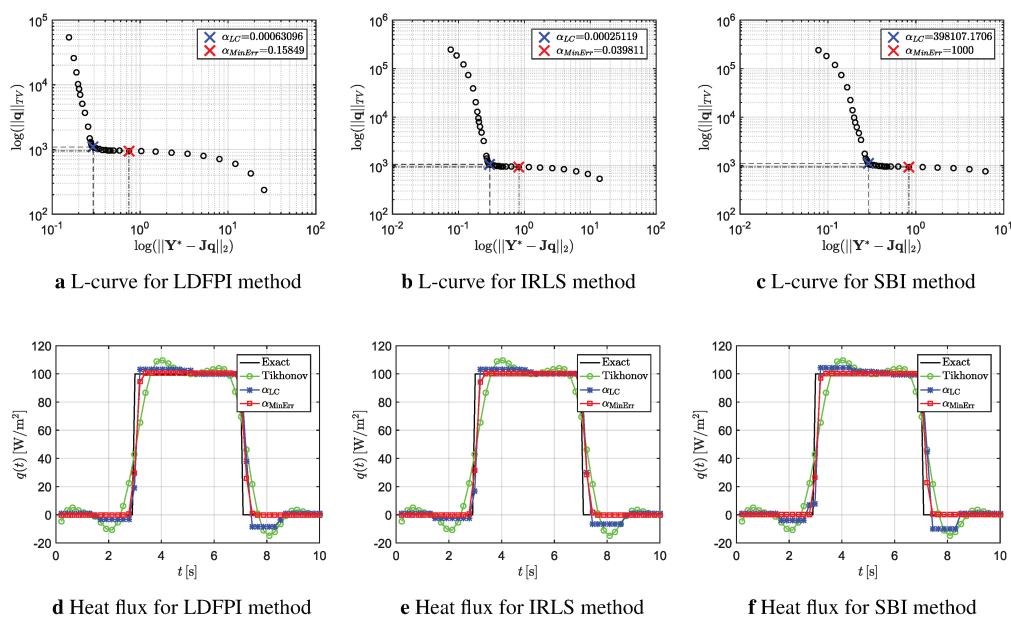
The L-curves constructed for every solution method are also depicted in Fig. B.3a-B.3c for the noise level  $\epsilon = 0.01$ , whereas Fig. B.4a-B.4c shows the same for  $\epsilon = 0.05$ . As a representative case of the outcome from the corresponding L-curve, Fig. B.2 exhibits the evolution of the heat flux reconstructions obtained by the IRLS method for  $\epsilon = 0.01$  (which provided the minimum error) for selected increasing values of the regularization parameter. It can be seen that the reconstruction for the first selected value is oscillatory, whereas for the last value it is very damped. The reconstructions corresponding to  $\alpha_{\text{LC}}$  and  $\alpha_{\text{MinErr}}$  are also depicted in Fig. B.2, being the former quite similar to the optimum. An intermediate amount of regularization between the last mentioned ones leads to the graph in the middle. Although the value obtained by the L-curve criterion is not the optimum, it still provides a very good result.



**Figure B.2:** Evolution of the heat flux reconstructions corresponding to different regularization parameters (Test Case A,  $\epsilon = 0.01$ ).



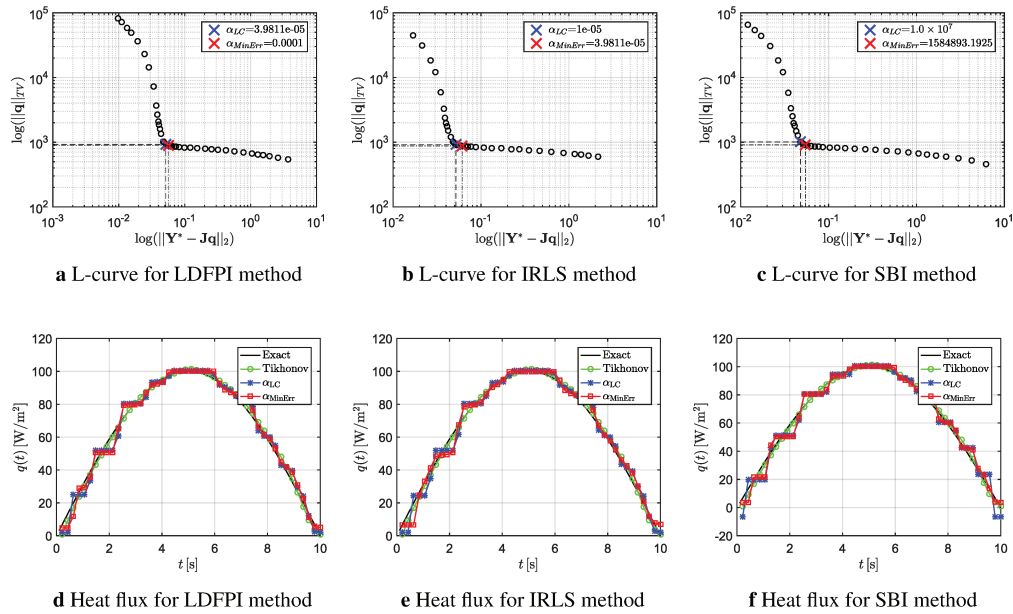
**Figure B.3:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case A,  $\epsilon = 0.01$ ).



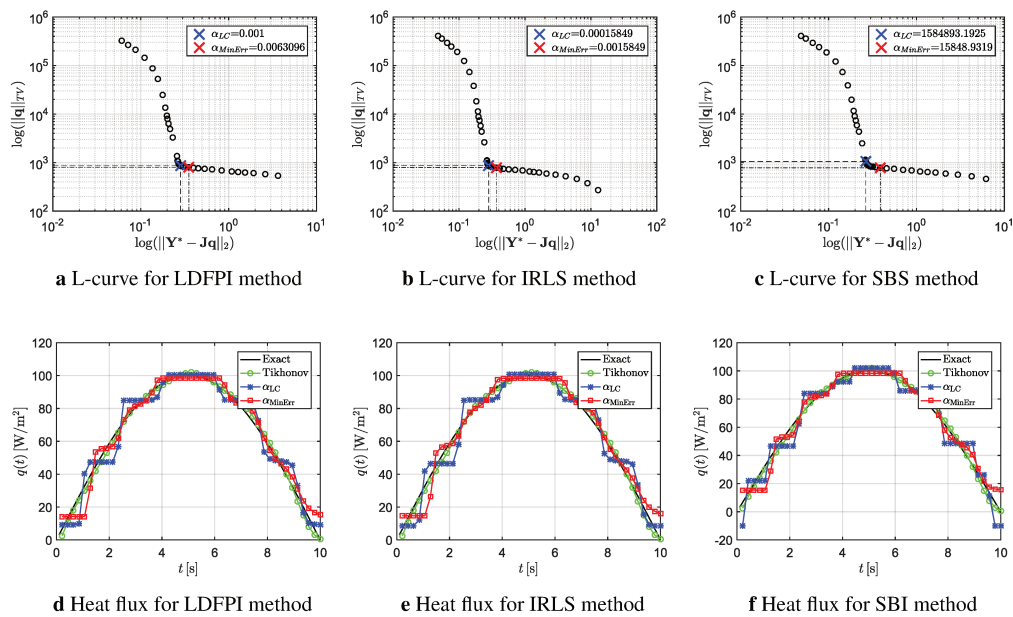
**Figure B.4:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case A,  $\epsilon = 0.05$ ).

**Test Case B.** The minimum error is attained with the Tikhonov model for the two levels of noise. The error values obtained with the  $\ell_2$ -TV methods, both for the regularization parameters  $\alpha_{LC}$  and  $\alpha_{MinErr}$ , are at least twice that reached with the Tikhonov model. However, the difference between the errors for these two regularization parameters are very low. This feature can be observed in Fig. B.5a-B.5c, where it is clearly seen that the location of  $\alpha_{MinErr}$  is practically coincident with the corner of the L-curve. With a noise level of  $\epsilon = 0.05$ , the location of the optimal regularization parameter moves slightly away from the corner, but is still close to it, see Fig. B.6a-B.6c. We can affirm that the L-curve criterion in this case is convergent.





**Figure B.5:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case B,  $\epsilon = 0.01$ ).



**Figure B.6:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case B,  $\epsilon = 0.05$ ).

The heat flux reconstructions are also presented in Fig. B.5d-B.5f for  $\epsilon = 0.01$ , and in Fig. B.6d-B.6f for  $\epsilon = 0.05$ . From these figures, it can be observed that the reconstructions exhibit the commonly known “staircase” effect (Mueller y Siltanen, 2012; Chan et al., 2000) induced by the first order, TV norm.

## 5. Discussion

From Table B.1 (Test Case A) we notice that the error values given by the L-curve criterion are larger than the minimum in all the cases, but it is observed that these errors decrease with the higher noise level.

Fig. B.3a-B.3c show that the optimum regularization parameter ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ ) is not placed at the corner of the L-curve, as it was previously mentioned in Fig. B.2. However, it is clearly closer in the case of the noise level  $\epsilon = 0.05$ , see Fig. B.4a-B.4c. This behavior indicates a non-convergence of the L-curve criterion, since the error measurement increases when the level of noise decreases. The literature indicates that the L-curve criterion is more likely to fail when a very smooth exact solution is to be estimated (Hanke, 1996), although the approach to the inverse problem in the latter reference is the Tikhonov model. So, it is not straightforward to assume that this possible issue may be present in the  $\ell_2$ -TV model. Further, the non-convergence is observed for the non-smooth exact heat flux considered in this Test Case.

The suitability of the L-curve criterion in Test Case A is questionable. The reconstructed heat fluxes given in Fig. B.3d-B.3f for the corresponding  $\alpha_{\text{LC}}$  parameters, can be rated as qualitatively good. The flatness of the parts where the heat flux does not change are generally preserved, but there are some discrepancies in the immediate instants after the first and second jumps. Moreover, the computed error for the three  $\ell_2$ -TV models (with  $\epsilon = 0.01$ ) are higher than the error attained by the Tikhonov method. Analyzing for the noise level  $\epsilon = 0.05$ , see Fig. B.4d-B.4f, we can also notice that the reconstructions have similar features to those obtained for  $\epsilon = 0.01$ . However, in this case the error computed for the three  $\ell_2$ -TV models are lower than the error with by the Tikhonov method.

With the SBI method, it can be seen that the optimum value of the regularization parameter is several orders of magnitude higher than that for the other methods. This is a consequence of the fact that the parameter  $\alpha$  modifies the terms containing products of the linear discrete operator  $\mathbf{J}$  with itself, and also with the modified given data  $\mathbf{Y}^*$  (see equation (B.14)). Since the sensitivity coefficients in our problem are very small, being the greater value in an order of magnitude of  $1e-4$  (for those placed in the main diagonal of the matrix  $\mathbf{J}$ ), the regularization parameter must to be large to enforce the influence of those terms. This feature is the opposite with respect to the other methods, where  $\alpha$  affects the terms including the discrete matrix for the TV regularization.

Recapitulating for Test Case A, we can affirm that the performance of the three  $\ell_2$ -TV methods is similar for both  $\alpha_{\text{MinErr}}$  and  $\alpha_{\text{LC}}$ , and that the estimated heat fluxes for  $\alpha_{\text{MinErr}}$  are practically equal to the exact heat flux for the both noise levels. Even though the L-curve criterion exhibited a non-converging behavior, the heat flux reconstructions were qualitatively acceptable for the both noise levels.

In Test Case B, the best that the  $\ell_2$ -TV models can do is to approach to the exact shape with the observed “blockier” (Mueller y Siltanen, 2012) fashion, which is emphasized when the noise level increases. An alternative to overcome this issue is to use higher order TV models, which are characterized not only by preserving the jump discontinuities, but also by providing smooth transitions (Chan et al., 2000). However, the implementation of these models is out of the scope of this work.

Even though the L-curve criterion exhibited a convergent behavior and that the optimum regularization parameter  $\alpha_{\text{MinErr}}$  is placed nearby the corner of the L-curves, it is observed that the qualitative difference between the corresponding heat flux reconstructions is more noticeable in this Test Case than in the previous one. Such a feature is a consequence of the influence of the staircase effect, which is also stronger when the noise level increases.

**Assessment of error measurement.** To further investigate the nature of the errors attained with the proposed methods and gaining more insights regarding their performance, we acknowledge that the mean square error MSE of the differences between the exact and the computed heat fluxes (which measures the performance of the model), is composed by a bias and a variance component (Woodbury y Beck, 2013; Farahani y Kowsary, 2012; Farahani et al., 2014; Khorrani et al., 2013). Woodbury y Beck (2013) obtained explicit expressions for these two components in the context of a linear IHCP solved via the Tikhonov method. Such expressions are possible to be derived because the Tikhonov formulation allows the direct computation of the heat flux, as shown previously in equation (B.10). The authors also discussed the relative influence of both components, being the optimum global error value a consequence of an appropriate trade-off between them. However, the recently mentioned explicit derivation of the different error components is not possible when using iterative solution methods. For this reason, Farahani y Kowsary (2012) and Farahani et al. (2014) directly computed the error components from the following formula:

$$V = \text{MSE} - D^2, \quad \text{MSE} = \text{RMSE}^2, \quad D = \sqrt{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^M [Q(t_m) - q_{\text{no-noise}}(t_m)]^2}, \quad (\text{B.17})$$

where MSE is the mean square error of the differences between the exact and the computed heat fluxes in presence of noisy measurements (which can be computed from equation (B.16)), and D is the root mean square error of the differences between the exact and the computed heat fluxes using noise-free measurements.

Since the proposed  $\ell_2$ -TV methods are essentially iterative, we will follow the approach of Farahani y Kowsary (2012) and Farahani et al. (2014). The components of the error measurements according to equation (B.17) are given in Table B.2. The different values of RMSE are gathered from the  $\alpha_{\text{MinErr}}$  column in Table B.1. It is possible to note that the variance component increased in all cases from  $\epsilon = 0.01$  to  $\epsilon = 0.05$ , which is expected behavior since the heat flux reconstructions are less accurate. Roughly speaking, the variance component doubled from the lowest to the highest noise level. Another noteworthy aspect is that RMSE in Test Case A is mainly dominated by the bias component, whereas in Test Case B both components are more balanced. Such behavior can be explained in terms of the nature of the exact heat flux function to be estimated and the limitations of the proposed methods concerning the staircase effect defined in the previous section. In Test Case B, the exact heat flux function is smooth and continuous, and the reconstructions exhibit the staircase effect (see figures B.5d-B.5f and figures B.6d-B.6f). However, the balance between the bias and variance components when  $\epsilon = 0.01$  leads to a near perfect match between the optimum  $\alpha_{\text{MinErr}}$  value and the regularization parameter  $\alpha_{\text{LC}}$  chosen via the L-curve criterion (see figures B.5a-B.5c). In such a case, the reconstruction is optimum for the considered noise level. Nevertheless, when  $\epsilon = 0.05$ , the variance increased and become the dominant component of the RMSE values, leading to a deviation between  $\alpha_{\text{LC}}$  and  $\alpha_{\text{MinErr}}$  (see figures B.6a-B.6c) which derived in sub-optimal reconstructions (see figures B.6d-B.6f).

On the other hand, in Test Case A the exact heat flux function is more easily recovered by the proposed methods since the staircase effect helps to find the correct reconstruction in all cases. This is why the unbalance between the bias and variance components does not significantly deteriorate the solutions.

However, such an unbalance leads to poor performance of the L-curve criterion with the considered noise levels. The fact that  $\alpha_{LC}$  and  $\alpha_{MinErr}$  tend to get closer when  $\epsilon = 0.05$  (compare figures B.3a-B.3c and figures B.4a-B.4c), together to an increase in the variance component, indicates that the proposed methods may be capable of dealing with even more noisy input data. In such cases, the L-curve criterion gives better predictions of the optimum regularization parameter.

To summarizing, the quality of the reconstructions is affected by the staircase effect. In Test Case A, such effect was beneficial to the reconstructions even though the bias and variance components were unbalanced. In Test Case B, the stair-casing was detrimental to the quality of the reconstructions. However, the proposed methods behave optimally when the bias and variance components were balanced (as with  $\epsilon = 0.01$ ). Hence, the unbalance between error components is evidenced by the performance of the L-curve criterion: the more the unbalance, the poorer the performance of the criterion. To control the relative effect between the two error components, a modification in the number of unknown parameters to be estimated may be needed, although the quality of the reconstructions may not be further improved because of the staircase effect.

**Tabla B.2:** Error bias and variance components for Test Cases A and B.

Case	Method	Bias (D)	$\epsilon = 0.01$		$\epsilon = 0.05$	
			RMSE	Variance (V)	RMSE	Variance (V)
Test Case A	LDFPI	7.9798	8.0253	0.8533	8.2085	1.9241
	IRLS	7.9597	8.0043	0.8438	8.1838	1.9020
	SBI	8.2872	8.3382	0.9208	8.5427	2.0736
Test Case B	LDFPI	2.5723	3.8192	2.9841	5.5442	5.0374
	IRLS	2.5645	3.9347	2.8230	5.6527	4.9113
	SBI	3.0591	4.4682	3.2567	5.7471	4.8652

## 5.1. Additional test cases

In this section, two additional test cases are considered, which are more challenging to the proposed TV-based methods than the already considered cases. The first one, denoted as *Test Case C*, is related to a saw-tooth exact heat flux function, whereas the second one, namely *Test Case D*, corresponds to an exact heat flux function composed by a superposition of sinusoidal functions having different amplitudes, frequencies, and initial phases. The main reason to include the former case is to prove the potential of the TV-based methods to reconstruct heat flux functions having many discontinuities within its domain, whereas the latter is focused on assessing the capability of such methods to recover small amplitude fluctuations in the input function.

The error values for the two additional Test Cases comparing the values associated to the  $\alpha_{LC}$  and  $\alpha_{MinErr}$  parameters are summarized in Table B.3, whereas Table B.4 shows the corresponding bias and variance components (as it was done in the previous section for Test Cases A and B). In a similar fashion that described with Test Case B, the performance of the L-curve criterion is optimum in Test Case D with  $\epsilon = 0.01$  (see figures B.9a-B.9c). In such a case, the bias and variance components are again balanced. The attained reconstructions were capable of recovering fluctuations as small as  $10 \text{ W/m}^2$  in amplitude in

the exact heat flux function when  $t \in [5, 8]$  (see figures B.9d-B.9f). Even with the greater noise level, the L-curve criterion performed well, despite the staircase effect hindered a better quality of the reconstruction (see figures B.10a-B.10c and figures B.10d-B.10f, respectively).

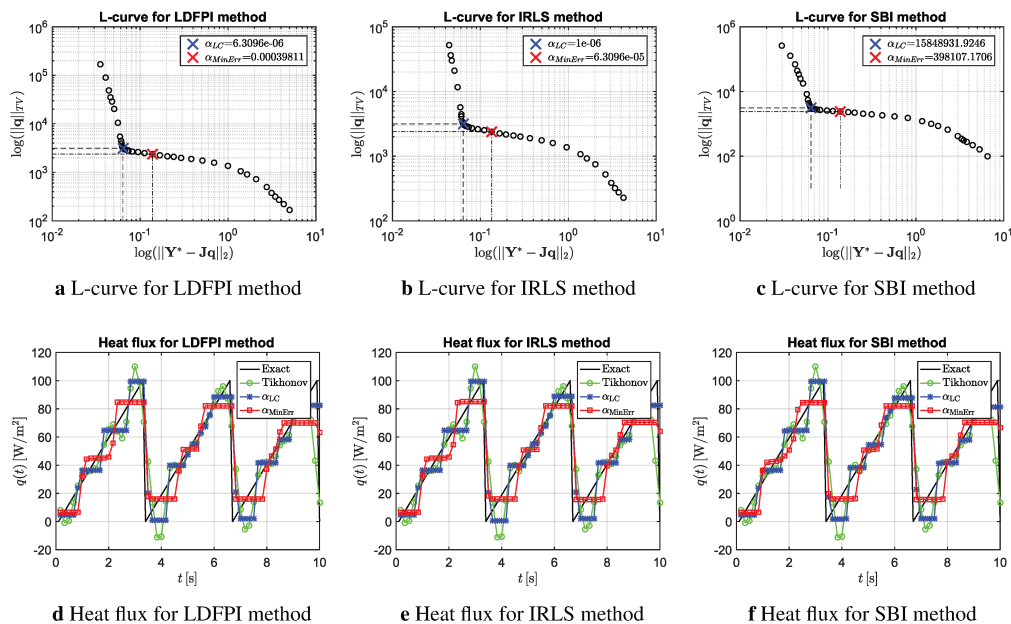
Regardless the staircase effect, the reconstructions attained in Test Case C have recovered in the best possible way the monotonously increasing parts of the exact heat flux (see figures B.7d-B.7f and figures B.8d-B.8f). The increase in the variance component when the noise level increased up to  $\epsilon = 0.05$  again lead to a better performance of the L-curve criterion (compare figures B.7a-B.7c with figures B.8a-B.8c).

**Tabla B.3:** Error values according to the RMSE formula for Test Cases C and D.

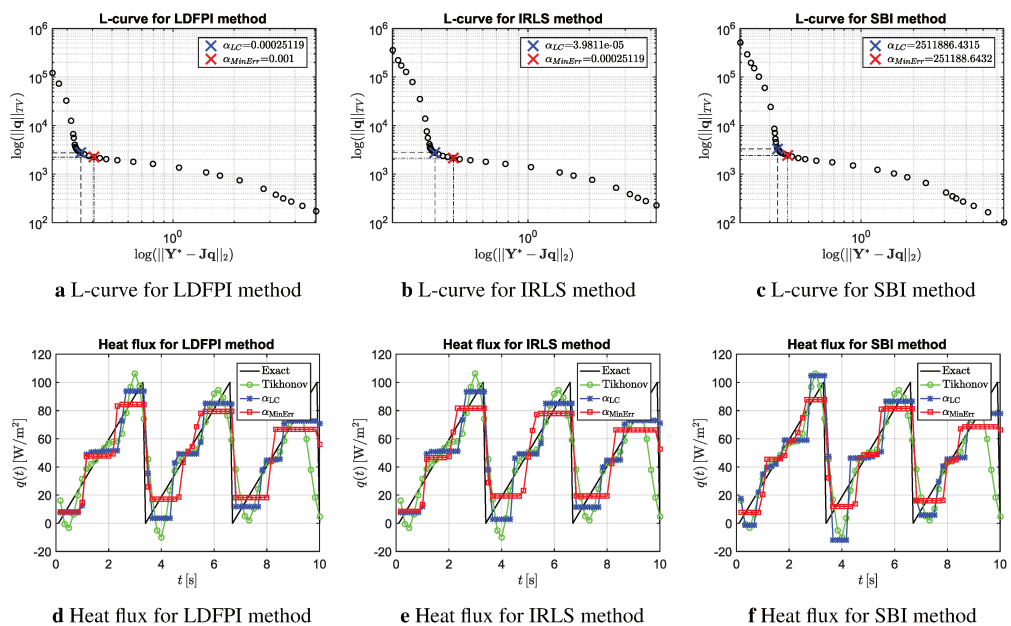
Method	Test Case C				Test Case D			
	$\epsilon = 0.01$		$\epsilon = 0.05$		$\epsilon = 0.01$		$\epsilon = 0.05$	
	L-curve		L-curve		L-curve		L-curve	
	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	( $\alpha_{\text{LC}}$ )	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	( $\alpha_{\text{LC}}$ )	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	( $\alpha_{\text{LC}}$ )	Minimum ( $\alpha_{\text{MinErr}}$ )	( $\alpha_{\text{LC}}$ )
LDFPI	14.4474	16.3793	<b>15.1242</b>	<b>16.2838</b>	<b>9.9439</b>	<b>10.7859</b>	12.7304	14.9686
IRLS	14.4851	16.3889	15.2168	16.5579	9.94948	10.9185	<b>12.6741</b>	14.9059
SBI	14.5013	<b>16.2922</b>	15.2158	18.9408	9.99664	11.1065	13.7352	<b>13.7352</b>
Tikhonov	<b>14.117</b>	-	17.6869	-	11.8174	-	15.6689	-

**Tabla B.4:** Error bias and variance components for Test Cases C and D.

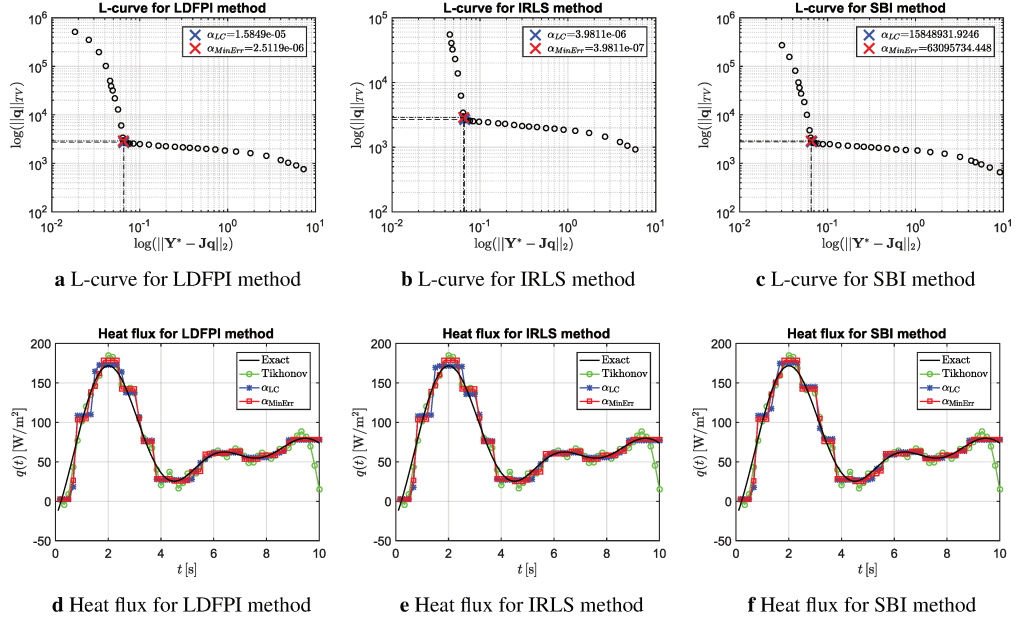
Case	Method	Bias (D)	$\epsilon = 0.01$		$\epsilon = 0.05$	
			RMSE	Variance (V)	RMSE	Variance (V)
Test Case C	LDFPI	14.3663	14.4474	1.52833	15.1242	4.72758
	IRLS	14.346	14.4851	2.00255	15.2168	5.07375
	SBI	14.2775	14.5013	2.53773	15.2158	5.26071
Test Case D	LDFPI	6.61784	9.9439	7.42196	12.7304	10.8751
	IRLS	6.6303	9.94948	7.41831	12.6741	10.8015
	SBI	6.93143	9.99664	7.20334	13.7352	11.8579



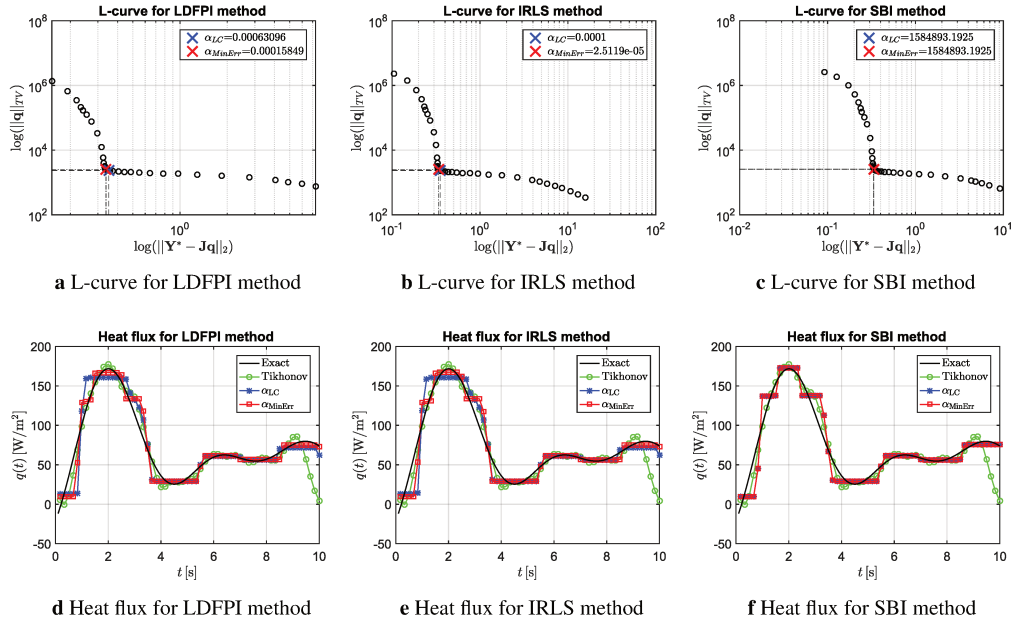
**Figure B.7:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case C,  $\epsilon = 0.01$ ).



**Figure B.8:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case C,  $\epsilon = 0.05$ ).



**Figure B.9:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case D,  $\epsilon = 0.01$ ).



**Figure B.10:** L-curves obtained for the three  $\ell_2$ -TV methods, and the corresponding heat flux reconstructions (Test Case D,  $\epsilon = 0.05$ ).

## 6. Conclusions

In this article, we have studied the use of a total variation penalty term in the formulation of the linear inverse heat conduction problem of estimating transient surface heat fluxes. This formulation, denoted as the  $\ell_2$ -TV problem is, to the authors' best knowledge, an unexplored alternative to the classical Tikhonov method for the case of surface heat flux reconstructions. We presented the discrete, finite element-based direct and inverse formulations of the linear, one-dimensional problems. Moreover, we found that very few

works involving total variation strategies were published in the field of the inverse heat conduction problem. The results demonstrated that the  $\ell_2$ -TV strategy, implemented through the lagged diffusivity fixed point iteration, the iteratively reweighted least-squares, and the split Bregman iteration methods, was a suitable approach to reconstruct a surface transient heat flux. It performed better when the exact heat flux to be recovered presented intrinsically a staircase shape as in Test Case A, whereas it has reconstructed in the best possible way the smooth varying heat fluxes involved in Test Cases B and D, and also the piecewise-discontinuous function concerning Test Case C, despite the presence of the staircase effect. The presence of noise in all cases affected negatively the reconstruction quality, but in the case of piecewise discontinuous functions, the increase in the global error as a consequence of the increment of the variance component tends to improve the balance with respect to the bias component, leading to a better performance of the L-curve criterion. Such an outcome indicates that despite its simple implementation and its widespread acceptance, the L-curve criterion must be used carefully. Other strategies such as the generalized cross-validation or the discrepancy principle methods may perform better, but their implementation is rather different because the regularization parameter is adaptively updated within the corresponding algorithm (Liu y Liu, 2010; Wen y Chan, 2011). Also, we can imply that a formal treatment needs to be done to explore the limitations of the L-curve criterion when it is applied in the  $\ell_2$ -TV problem, as was done by Hanke (1996). Hence, the  $\ell_2$ -TV approach to reconstruct a transient surface heat flux is a valid strategy with promising results. Furthermore, the reconstructions could be improved by using higher-order TV methods as in (Chan et al., 2000). Such an alternative is left as future work.

## References

- Abdelhamid T., Elsheikh A., Elazab A., Sharshir S., Selima E.S., y Jiang D. Simultaneous reconstruction of the time-dependent Robin coefficient and heat flux in heat conduction problems. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 26(9):1231–1248, 2018.
- Alifanov O.M. *Inverse Heat Transfer Problems*. Springer, 1994.
- Aster R.C., Borchers B., y Thurber C.H. *Parameter estimation and inverse problems*. Elsevier, 2018.
- Baranger T., Andrieux S., y Rischette R. Combined energy method and regularization to solve the Cauchy problem for the heat equation. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 22(1):199–212, 2014.
- Beck J.V. Filter solutions for the nonlinear inverse heat conduction problem. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 16(1):3–20, 2008.
- Beck J.V., Blackwell B., y Clair Jr C.R.S. *Inverse Heat Conduction: Ill-Posed Problems*. James Beck, 1985.
- Beck J.V. y Woodbury K.A. Inverse heat conduction problem: sensitivity coefficient insights, filter coefficients, and intrinsic verification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 97:578–588, 2016.
- Cabeza J.M.G., García J.A.M., y Rodríguez A.C. A sequential algorithm of inverse heat conduction problems using singular value decomposition. *International Journal of Thermal Sciences*, 44(3):235–244, 2005.
- Chan T., Marquina A., y Mulet P. High-order total variation-based image restoration. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 22(2):503–516, 2000.



- Chan T.F., Golub G.H., y Mulet P. A nonlinear primal-dual method for total variation-based image restoration. *SIAM journal on scientific computing*, 20(6):1964–1977, 1999.
- Colaço M.J. y Orlande H.R. Comparison of different versions of the conjugate gradient method of function estimation. *Numerical Heat Transfer: Part A: Applications*, 36(2):229–249, 1999.
- Colaço M.J., Orlande H.R., y Dulikravich G.S. Inverse and optimization problems in heat transfer. *Journal of the Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering*, 28(1):1–24, 2006.
- Dowding K. y Beck J. A sequential gradient method for the inverse heat conduction problem (IHCP). *Journal of heat transfer*, 121(2):300–306, 1999.
- Duda P. A general method for solving transient multidimensional inverse heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 93:665–673, 2016.
- Duda P. Solution of inverse heat conduction problem using the Tikhonov regularization method. *Journal of Thermal Science*, 26(1):60–65, 2017.
- Farahani S. y Kowsary F. Estimation local convective boiling heat transfer coefficient in mini channel. *International communications in heat and mass transfer*, 39(2):304–310, 2012.
- Farahani S., Kowsary F., y Jamali J. Direct estimation of local convective boiling heat transfer coefficient in mini-channel by using conjugated gradient method with adjoint equation. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 55:1–7, 2014.
- Farahani S.D. y Kisomi M.S. Experimental estimation of temperature-dependent thermal conductivity coefficient by using inverse method and remote boundary condition. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 117:104736, 2020.
- Gholami A. y Hosseini S.M. A balanced combination of Tikhonov and total variation regularizations for reconstruction of piecewise-smooth signals. *Signal Processing*, 93(7):1945–1960, 2013.
- Gilles J. The Bregman Cookbook. *Bregman Cookbook*, páginas 10–30, 2011.
- Goldstein T. y Osher S. The split Bregman method for  $\ell_1$ -regularized problems. *SIAM journal on imaging sciences*, 2(2):323–343, 2009.
- Hanke M. Limitations of the L-curve method in ill-posed problems. *BIT Numerical Mathematics*, 36(2):287–301, 1996.
- Hansen P.C. Analysis of discrete ill-posed problems by means of the L-curve. *SIAM review*, 34(4):561–580, 1992.
- Hansen P.C. Regularization tools: a Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems. *Numerical algorithms*, 6(1):1–35, 1994.
- Hansen P.C. The L-curve and its use in the numerical treatment of inverse problems. 1999.
- Hao D.N. y Reinhardt H.J. Gradient methods for inverse heat conduction problems. *Inverse Problems in Engineering*, 6(3):177–211, 1998.
- Huntul M. y Lesnic D. An inverse problem of finding the time-dependent thermal conductivity from boundary data. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 85:147–154, 2017.
- Khorrami M., Samadi F., Kowsary F., y Mohammadzaheri M. Online estimation of multicomponent heat flux using a system identification technique. *International communications in heat and mass transfer*, 44:127–134, 2013.

- Lamm P.K. Future-sequential regularization methods for ill-posed Volterra equations: Applications to the inverse heat conduction problem. *Journal of mathematical analysis and applications*, 195(2):469–494, 1995.
- Li Z. y Deng Z. A total variation regularization method for an inverse problem of recovering an unknown diffusion coefficient in a parabolic equation. *Inverse Problems in Science and Engineering*, páginas 1–21, 2020.
- Liu C.S. y Chang C.W. A simple algorithm for solving cauchy problem of nonlinear heat equation without initial value. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 80:562–569, 2015.
- Liu P. y Liu D. Selection of regularization parameter based on generalized cross-validation in total variation remote sensing image restoration. En *Image and Signal Processing for Remote Sensing XVI*, volumen 7830, página 78301P. International Society for Optics and Photonics, 2010.
- Liu X. y Huang L. Split Bregman iteration algorithm for total bounded variation regularization based image deblurring. *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, 372(2):486–495, 2010.
- Lu Z.R., Pan T., y Wang L. A sparse regularization approach to inverse heat source identification. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 142:118430, 2019.
- Mohebbi F., Evans B., Shaw A., y Sellier M. An inverse analysis for determination of space-dependent heat flux in heat conduction problems in the presence of variable thermal conductivity. *International Journal for Computational Methods in Engineering Science and Mechanics*, 20(3):229–241, 2019.
- Mueller J.L. y Siltanen S. *Linear and nonlinear inverse problems with practical applications*. SIAM, 2012.
- Nejad A.A., Maghrebi M.J., Tabrizi H.B., Heng Y., Mhamdi A., y Marquardt W. Optimal operation of alloy material in solidification processes with inverse heat transfer. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 37(6):711–716, 2010.
- Ozisk M.N. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*. CRC Press, 2000.
- Rodríguez P. Total variation regularization algorithms for images corrupted with different noise models: a review. *Journal of Electrical and Computer Engineering*, 2013, 2013.
- Rudin L.I., Osher S., y Fatemi E. Nonlinear total variation based noise removal algorithms. *Physica D: nonlinear phenomena*, 60(1-4):259–268, 1992.
- Samadi F., Kowsary F., y Sarchami A. Estimation of heat flux imposed on the rake face of a cutting tool: a nonlinear, complex geometry inverse heat conduction case study. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 39(2):298–303, 2012.
- Samadi F., Woodbury K., y Kowsary F. Optimal combinations of Tikhonov regularization orders for IHCPs. *International Journal of Thermal Sciences*, 161:106697, 2021.
- Song X., Xu Y., y Dong F. A hybrid regularization method combining Tikhonov with total variation for electrical resistance tomography. *Flow Measurement and Instrumentation*, 46:268–275, 2015.
- Vogel C.R. *Computational methods for inverse problems*. SIAM, 2002.
- Vogel C.R. y Oman M.E. Fast, robust total variation-based reconstruction of noisy, blurred images. *IEEE transactions on image processing*, 7(6):813–824, 1998.
- Wang Y., Yin W., y Zhang Y. A fast algorithm for image deblurring with total variation regularization. páginas 07–10, 2007.

- Wen J., Yamamoto M., y Wei T. Simultaneous determination of a time-dependent heat source and the initial temperature in an inverse heat conduction problem. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 21(3):485–499, 2013.
- Wen Y.W. y Chan R.H. Parameter selection for total-variation-based image restoration using discrepancy principle. *IEEE Transactions on Image Processing*, 21(4):1770–1781, 2011.
- Wohlberg B. y Rodríguez P. An iteratively reweighted norm algorithm for minimization of total variation functionals. *IEEE Signal Processing Letters*, 14(12):948–951, 2007.
- Woodbury K.A. y Beck J.V. Estimation metrics and optimal regularization in a Tikhonov digital filter for the inverse heat conduction problem. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 62:31–39, 2013.
- Yang X., Hofmann R., Dapp R., Van de Kamp T., dos Santos Rolo T., Xiao X., Moosmann J., Kashef J., y Stotzka R. TV-based conjugate gradient method and discrete L-curve for few-view CT reconstruction of X-ray in vivo data. *Optics express*, 23(5):5368–5387, 2015.
- Yang X., Yang Z., Yan J., Wu L., y Jiang M. Multi-parameter regularization method for synthetic aperture imaging radiometers. *Remote Sensing*, 13(3):382, 2021.
- Yin W., Osher S., Goldfarb D., y Darbon J. Bregman iterative algorithms for  $\ell_1$ -minimization with applications to compressed sensing. *SIAM Journal on Imaging sciences*, 1(1):143–168, 2008.
- Zhang X. y Ng M.K. A fast algorithm for solving linear inverse problems with uniform noise removal. *Journal of Scientific Computing*, 79(2):1214–1240, 2019.
- Zueco J., Alhama F., y Fernandez C.G. Inverse determination of heat generation sources in two-dimensional homogeneous solids: Application to orthotropic medium. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 33(1):49–55, 2006.



## **Anexo C**

# **Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso cuasi-Newton secuencial**

El siguiente artículo ha sido presentado en el “XXXVII Congreso argentino de mecánica computacional (MECOM 2021), (Resistencia, Chaco; 1 al 5 de noviembre de 2021)”:

B.A. Tourn, J.C. Álvarez Hostos, V.D.Fachinotti, “*Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso cuasi-Newton secuencial*”.



# Caracterización del proceso de transferencia de calor superficial durante un tratamiento térmico de austemperado utilizando el método inverso cuasi-Newton secuencial

B.A. Tourn<sup>a</sup>, J.C. Álvarez Hostos<sup>b</sup>, V.D. Fachinotti<sup>b1</sup>

<sup>a</sup>Centro de Investigación y Transferencia Rafaela (UNRaf-CONICET), CP2300 Santa Fe, Argentina

<sup>b</sup>CIMEC-UNL-CONICET, Predio Conicet “Dr Alberto Cassano”, CP 3000 Santa Fe, Argentina

Palabras clave: PTICC, MQNS, MGC, ADI, Flujo de calor.

## Resumen

En este trabajo implementamos un método inverso secuencial basado en gradiente, particularmente el método Quasi-Newton secuencial (MQNS), 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”. En otras palabras, el método es capaz de computar la solución al problema inverso en tiempo cuasi-real con respecto a la adquisición de datos. Por otra parte, el modelado del problema térmico se llevó a cabo utilizando una formulación no lineal en una geometría axisimétrica. A su vez, la implementación del MQNS fue adaptada para tales efectos. Los resultados muestran que la curva de evolución temporal del flujo de calor superficial obtenida con el MQNS 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

---

<sup>1</sup>Autor correspondiente. Dirección de E-mail: vfachinotti@cimec.unl.edu.ar (V.D. Fachinotti).

tratamiento térmico.

## 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 bi-dimensional 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 Quasi-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 MQNS; 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 C.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:

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

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

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

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

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

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  $t = 0$ .

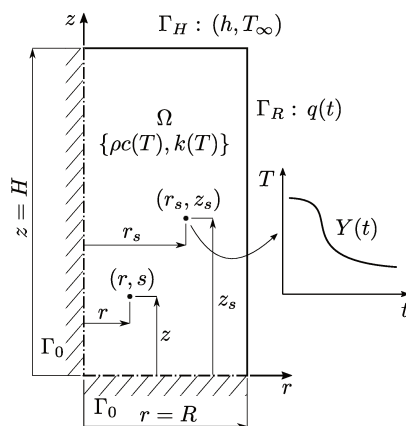


Figura C.1: Geometría del problema bidimensional axisimétrico.

## 2.2. Formulación de elementos finitos

Utilizaremos el método de elementos finitos (MEF) para la resolución numérica del PCIB (C.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 (C.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:

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

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

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

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

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

Podemos apreciar que la dependencia temporal de la condición de borde (C.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 (C.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 (C.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 C.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 cuasi-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 (C.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 (C.1) (Ozisik et al., 2002; Razzaghi et al., 2019), como

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

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

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

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

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

Luego, escribimos la expresión de la siguiente función objetivo

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Debido a la equivalencia matemática entre los problemas térmico (C.1), de sensibilidad (C.4) y adjunto (C.7), todos ellos se resolverán empleando la misma formulación numérica. Nótese que la ecuación (C.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:

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

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:

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

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

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

## 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:

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

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 Quasi-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  $t \geq 0$ .

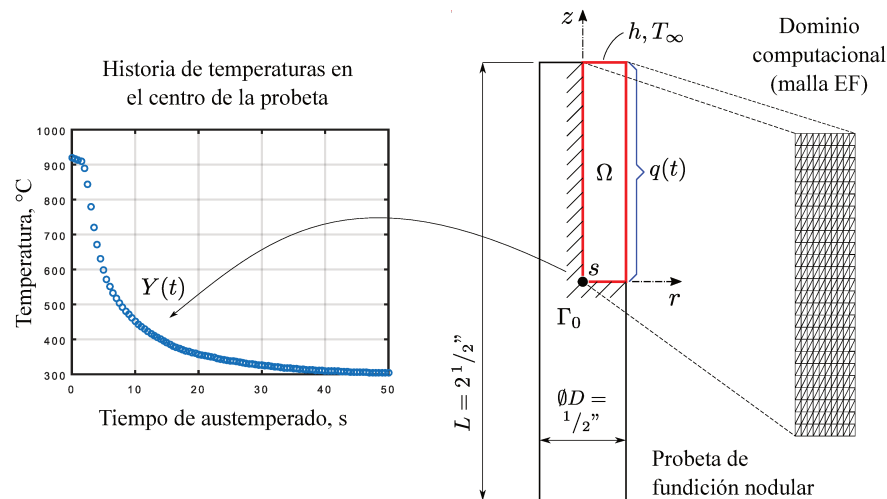
## 4.3. Algoritmo computacional para la implementación secuencial

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 (C.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 (C.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 (C.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 (C.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 (C.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.



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

## 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 C.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 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  $h = 500 \text{ W}/(^{\circ}\text{C} \cdot \text{m}^2)$ .

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 efecti-

vo”  $\rho_{c_{ef}}$ , 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 MQNS se evaluará a través de la siguiente fórmula de la raíz cuadrada del error medio cuadrático (RMSE, por sus siglas en inglés):

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

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 MQNS.

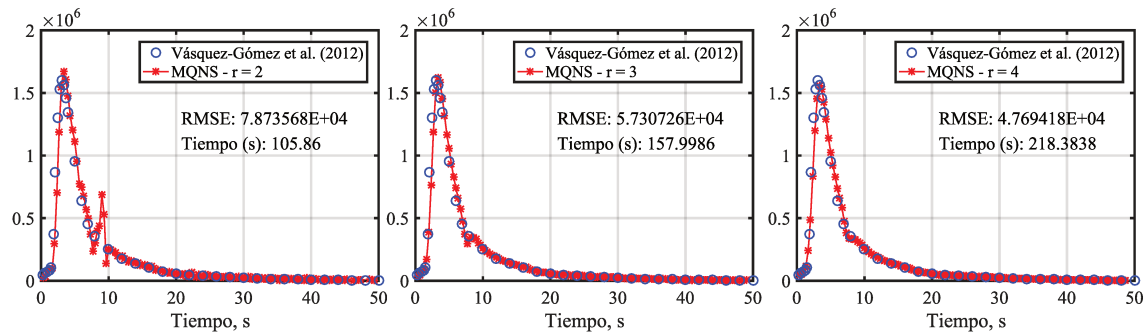
Por último, evaluaremos la posibilidad de asumir una linearización temporal del problema térmico en el paso N°4 del algoritmo computacional descrito en la sección 4.3 como lo sugiere Beck y Osman (1989), teniendo en cuenta que la duración del problema en el dominio temporal reducido  $[t_m, t_{m+r-1}]$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

## 6. Resultados y discusión

La figura C.3 muestra los flujos de calor computados utilizando el MQNS 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 (C.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 C.3:** Flujo de calor (en  $W/m^2$ ) obtenido con el MQNS en comparación a la referencia.

Por otra parte, el método propuesto diverge en todos los casos al implementar la linearización temporal en el paso  $N^{\circ}4$  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 Quasi-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 axi-simetría, 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  $N^{\circ}4$  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. *Strojniski 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.

## Anexo D

# Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime

El artículo presentado a continuación ha sido publicado en la revista “**Numerical Heat Transfer, Part A**”:

J.C. Álvarez Hostos, V.D.Fachinotti, I. Peralta, B.A. Tourn, “*Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime*”.



# Computational design of metadevices for heat flux manipulation considering the transient regime

Juan C. Álvarez Hostos<sup>\*,a,b</sup>, Víctor D. Fachinotti<sup>a</sup>, Ignacio Peralta<sup>a,c</sup>, Benjamín A. Tourn<sup>a</sup> <sup>a</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.

<sup>b</sup>Department of Chemical Metallurgy, Universidad Central de Venezuela, Caracas, Venezuela

<sup>c</sup>Laboratorio de Flujiometría (FLOW), Facultad Regional Santa Fe (FRSF), Universidad Tecnológica Nacional (UTN), Lavaise 610, 3000, Santa Fe, Argentina

Keywords: metadevices, transient analysis, shielding, cloaking, optimization, anisotropic

## Abstract

The present work introduces the optimization-based approach for the design of metadevices to manipulate the heat flux in transient regime. It consists of solving a continuous, nonlinear, constrained, large-scale optimization problem where the objective function (to be minimized) is the error in accomplishing a given heat flux manipulation task along a transient heat conduction process. The response of the metadvice is modeled by using the finite element method, and its design is characterized by a set of parameters defining the material at all the finite elements in the device. These parameters are the design variables of the optimization problem, being chosen from an admissible design set in order to guarantee the feasibility of the optimal solution. As an example, this optimization-based approach is applied to the design of a heat flux shielding metadvice. Compared to a metadvice designed under the classical thermodynamics transformation approach and intuition, the current device performs the shielding task with considerably higher success. In order to highlight the versatility of the proposed optimization-based design method, this approach is also applied to the design of metadevices to satisfy multiple different simultaneous tasks, particularly shielding and cloaking.

## 1. Introduction

Recently, the development of engineered materials (the so-called “metamaterials”) has allowed the control of heat flux in unprecedented ways. Outstanding examples are the metamaterials (or those devices made of or behaving as metamaterials, the so-called “metadevices”) for heat flux inversion (Narayana y Sato, 2012; Fachinotti et al., 2018a), concentration (Li et al., 2016; Guenneau et al., 2012; Narayana y Sato, 2012; Peralta et al., 2017; Peralta y Fachinotti, 2017), shielding (Narayana y Sato, 2012; Narayana et al., 2013) and cloaking (Yuan et al., 2016; Schittny et al., 2013; Peralta et al., 2017; Zhang et al., 2015; Xu et al., 2017; Liu et al., 2017) under heat conduction. Regarding the design of these thermal metadevices, the classical approach is based on thermodynamics transformation, which has been inherited from electromagnetism (Pendry et al., 2006). This design methodology, henceforth called transformation-based approach, has been applied to heat flux manipulation tasks under steady state (Narayana y Sato, 2012; Zhang et al., 2015; Yuan et al., 2016; Xu et al., 2017), as well as transient regime (Narayana et al., 2013; Schittny et al., 2013; Guenneau et al., 2012).

Considering transient problems, Narayana et al. (2013) made a metadevice for heat flux shielding in the course of a transient heat conduction process, whose performance was measured in terms of the heating rate decrease at the center of the shielded region. This metadevice was constructed attempting to emulate the anisotropic and inhomogeneous thermal conductivity determined by Guenneau et al. (2012) using the transformation-based approach, whereas the volumetric heat capacity was derived on an empirical basis. On the other hand, Schittny et al. (2013) made a metadevice for thermal cloaking in transient regime intending to emulate not only the inhomogeneous and anisotropic thermal conductivity, but also the inhomogeneous volumetric heat capacity determined by Guenneau et al. (2012). However, the best deal they could get was constant capacity due to manufacturability concerns.

Besides the difficulty or even impossibility of accurately matching the resulting effective properties, the transformation-based design approach involves quite simple geometries and boundary conditions. In all the applications of this approach in the currently surveyed literature, the whole problem is defined in a two-dimensional rectangular or circular domain with an homogeneous heat flux prescribed on its boundaries, and the metadevice is an annular plate surrounding a region where the task is prescribed. Up to our knowledge, the highest geometrical complexity ever handled with the transformation-based approach is due to Liu et al. (2017), who determined the distributions of thermal conductivity and volumetric heat capacity required for shielding and cloaking the heat flux in regular polygonal regions.

Any change in the problem geometry, the heat flux manipulation task, or the boundary conditions, makes necessary to obtain the solution of a different thermodynamics transformation problem. Further, the transformation-based approach gives the distribution of the effective properties required to fulfill a given heat flux manipulation task, without dictating how to obtain these properties. Such a feature makes necessary to devise ways of combining ordinary materials in order to mimic the required effective properties, which is often achieved in just an approximate way. Actually, it has not yet been achieved an accurate match of both thermal conductivity and heat capacity distributions dictated by the transformation-based approach for heat flux manipulation in transient regime.

The aforementioned difficulties can be overcome by using the optimization-based approach for the design of metamaterials and metadevices, where the accomplishment of a given task is quantified in terms of an objective function whose minimization determines the material distribution. The pioneering optimization-based approach is the well-known topology optimization (TO) method (Bendsøe y Sigmund, 2003), originally developed for structural problems, where the design variables determine the existence of material at a point of the design domain. Thanks to its versatility, topology optimization has been successfully extended to heat transfer problems (Ha y Cho, 2008; Zhuang et al., 2013; Zhuang y Xiong, 2014, 2015; Zhou et al., 2016; Pizzolato et al., 2017; Yan et al., 2018; Long et al., 2018). Focusing on the design of metamaterials and metadevices, the design variables are the parameters determining the inhomogeneous microstructure in the design domain. In the metadvice proposed by Dede (2010), the design variable is the orientation of inclusions at a point of a composite plate and the objective function (to be minimized) is the thermal resistance of the whole metadvice. Later, Dede et al. (2014) used as design variable the orientation of elliptic inclusions in devices conceived for the concentration, inversion or shielding of the heat flux. In such a study, each task was represented by its own objective function. Recently, Peralta et al. (2017) proposed an optimization-based approach for the design of metamaterials and metadevices for general heat manipulation tasks, including shielding, cloaking, concentration and reversion, all of them represented by a unique objective function. Further, any material with quantitatively characterized microstructure can be accounted for, making this approach embody all the preceding ones. In (Peralta et al., 2017), an example of a metadvice for simultaneous concentration and cloaking is developed, using as metamaterial a bilayered laminate whose orientation and relative layer thickness are the design variables to be optimized. Later, in seek of easier manufacturability, Peralta y Fachinotti (2017) proposed as design variables the fraction of a finite number of candidate, standard materials, which is basically a multimaterial topology optimization problem. In a further effort towards manufacturability, Fachinotti et al. (2018b) used only two isotropic materials with highly contrasting conductivity to build a metadvice for heat flux manipulation. In this case, the design variable was the density of one of the materials, recovering the standard TO procedure. As example of the different tasks that can be tackled with this approach, Fachinotti et al. (2018b) designed simple and easy-to-fabricate metadevices for reversion (with and without cloaking), concentration and shielding.

A crucial issue of the optimization-based design approach is the use of gradient-based algorithms (Nocedal y Wright, 2006). In the context of shape and size optimization in heat transfer problems, recourse has been made (Hung et al., 2013; Xie et al., 2016) to numerical differentiation in order to compute the sensitivity of the objective function, or to the implementation of derivative-free optimization techniques, including genetic (Yang et al., 2016; Wu et al., 2017) and ball-spine (Hesami y Mayeli, 2016) algorithms, particle swarm optimization (Siavashi et al., 2017), and even pareto frontiers based on polynomial response surfaces for multi-objective optimization problems (Zhang y Jaluria, 2018). However, such procedures are only affordable in problems with a few design variables. On the other hand, in the current design problems, the number of design variables is proportional to the number of points with variable microstructure throughout the metadvice, which is usually large. For large-scale optimization problems like these, the adjoint method (Tortorelli y Michaleris, 1994) is the most efficient way of computing the gradient of the objective function. Applications of the adjoint method related to heat transfer problems can be found in (Ha

y Cho, 2008; Haghghi et al., 2012; Rahideh et al., 2012; Zhuang et al., 2013; Zhuang y Xiong, 2014, 2015; Pizzolato et al., 2017; Long et al., 2018). The adjoint method was the preferred technique for sensitivity analysis in the preceding work regarding optimization-based design of metadevices, being applied not only to thermal (Fachinotti et al., 2018a; Peralta et al., 2017; Peralta y Fachinotti, 2017), but also to mechanical (Fachinotti et al., 2018b) and thermomechanical (Hostos et al., 2019) ones. A close precedent to the current sensitivity analysis in case of transient heat conduction is that developed by Chen y Tong (2004, 2005) for functionally graded materials, which was subsequently extended to TO by Zhuang et al. (2013); Zhuang y Xiong (2014). In this work, the adjoint method will be developed for quantitatively-characterized microstructures and general heat manipulation tasks along transient heat conduction.

Up to now, the optimization-based approach has been successfully applied to the design of thermal metadevices conceived to perform heat flux manipulation tasks only in steady state. Accordingly, in this study we introduce a novel implementation of such an approach by adapting the adjoint sensitivity analysis for transient problems, to the design of metadevices whose tasks are prescribed along a given time interval in transient regime. In summary, the present study is oriented to develop the optimization-based approach for the design of thermal metadevices to accomplish completely general heat flux manipulation tasks during transient heat conduction processes.

## 2. Governing Equations

The optimization based design of thermal metadevices involves the minimization of a given objective function, which quantifies the error in the accomplishment of a prescribed heat flux manipulation task. Such a minimization procedure is subject to the fulfillment of the thermal energy balance equation, which is solved in this work by using the finite element method (FEM).

### 2.1. Transient heat conduction

The domain  $\Omega$  depicted in Fig. D.1 represents a solid heterogeneous material, whose boundary  $\Gamma$  is divided in two non-overlapping portions  $\Gamma_q$  and  $\Gamma_T$  with prescribed heat flux  $q_{\text{wall}}$  and temperature  $T_{\text{wall}}$ , respectively. In transient regime, the temperature  $T$  in  $\Omega$  is governed by the thermal energy balance:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \cdot (\mathbf{k} \nabla T) + \dot{Q}, \quad (\text{D.1})$$

subject to the initial condition

$$T = T_0 \quad \text{at } t = 0, \quad (\text{D.2})$$

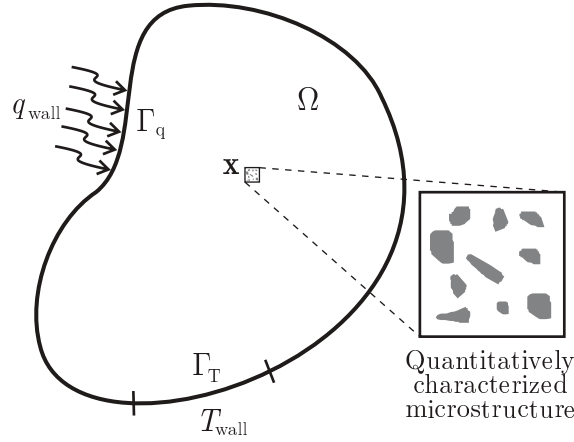
and the boundary conditions:

$$T = T_{\text{wall}} \quad \text{on } \Gamma_T, \quad (\text{D.3})$$

$$-\mathbf{k} \nabla T \cdot \mathbf{n} = q_{\text{wall}} \quad \text{on } \Gamma_q, \quad (\text{D.4})$$



where  $\rho c$  is the effective volumetric heat capacity,  $\mathbf{k}$  is the second-order tensor of effective thermal conductivity,  $\dot{Q}$  is the internal heat source, and  $\mathbf{n}$  is the unit vector normal to and pointing outwards  $\Gamma_q$ .



**Figure D.1:** Thermal problem in a macroscopic domain  $\Omega$  where the effective properties depend on a quantitatively characterized microstructure.

Eq. (D.1) is solved using the FEM. Accordingly, the temperature field is approximated as follows:

$$T(\mathbf{x}, t) \approx N_j(\mathbf{x}) T_j(t) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{T}(t), \quad \text{for all } \mathbf{x} \in \Omega, \quad (\text{D.5})$$

where  $N_j$  is the shape function associated to the node  $j$  of the finite element mesh representing  $\Omega$ , and  $T_j$  is the unknown temperature of this node. Using the standard Galerkin FEM, the thermal energy balance gives rise to the following algebraic system of equations for the nodal temperature vector  $\mathbf{T}$ :

$$\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} = \mathbf{Q}, \quad (\text{D.6})$$

where  $\mathbf{C}$ ,  $\mathbf{K}$  and  $\mathbf{Q}$  are the global capacitance matrix, conduction matrix and heat load vector, respectively, given by

$$\mathbf{C} = \int_{\Omega} \rho c \mathbf{N}^T \mathbf{N} \, d\Omega, \quad (\text{D.7})$$

$$\mathbf{K} = \int_{\Omega} \mathbf{B}^T \mathbf{k} \mathbf{B} \, d\Omega, \quad (\text{D.8})$$

$$\mathbf{Q} = \int_{\Omega} \dot{Q} \mathbf{N} \, d\Omega + \int_{\Gamma_q} q_{\text{wall}} \mathbf{N} \, d\Gamma_q, \quad (\text{D.9})$$

with  $B_{ij} = \partial N_i / \partial x_j$ , such that  $\nabla T \approx \mathbf{B}\mathbf{T}$ .

The transient problem (D.6) is integrated in time using the unconditionally stable implicit backward difference scheme (Nithiarasu et al., 2016), giving rise to the fully algebraic system of equations at each time instant  $t + \Delta t$ :

$$\mathbf{C} \frac{\mathbf{T}_{t+\Delta t} - \mathbf{T}_t}{\Delta t} + \mathbf{K}\mathbf{T}_{t+\Delta t} = \mathbf{Q}, \quad (\text{D.10})$$

to be solved to determine the temperature at the instant  $\mathbf{T}_{t+\Delta t}$  once the previous temperature  $\mathbf{T}_t$  is known.

Now, let us assume that the portion  $\Omega_{\text{dev}} \subset \Omega$  occupied by the metadvice to be designed, is made of an heterogeneous quantitatively characterized material whose effective properties are determined by particular microstructure parameters (or microparameters). Following (Peralta et al., 2017; Peralta y Fachinotti, 2017; Fachinotti et al., 2018a), the microparameters are assumed to vary element-wise in  $\Omega_{\text{dev}}$ . At a generic finite element  $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{dev}}$ , the microstructure is defined by a set of  $M$  microparameters arranged in the vector  $\mathbf{p}^{(e)}$ . Examples of such microparameters are the thickness and orientation of layers in laminates (Peralta et al., 2017; Peralta y Fachinotti, 2017; Hostos et al., 2019), the orientation of non spherical inclusions in composites (Dede, 2010; Dede et al., 2014), the density and the irregularity factors in materials with isolated inhomogeneities (Kachanov y Sevostianov, 2005), the size of prismatic inclusions in an elastic composite (Fachinotti et al., 2015), the fiber orientation in fiber-reinforced polymers (Lund y Stegmann, 2005), the size of particles or beads in coating of dental implants (Chen et al., 2013), among others.

Being the microstructure in  $\Omega^{(e)}$  characterized by  $\mathbf{p}^{(e)}$ , the effective properties at each point  $\mathbf{x} \in \Omega^{(e)}$  are functions of  $\mathbf{p}^{(e)}$ . Here, this is the case of the conductivity and the heat capacity:

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{k}}(\mathbf{p}^{(e)}), \quad (\text{D.11})$$

$$\rho c(\mathbf{x}) = \hat{\rho}c(\mathbf{p}^{(e)}). \quad (\text{D.12})$$

Accordingly, the global capacitance and conduction matrices,  $\mathbf{K}$  and  $\mathbf{C}$  respectively, are functions of the vector

$$\mathbf{P} = \left[ \mathbf{p}^{(1)}, \mathbf{p}^{(2)}, \dots, \mathbf{p}^{(N)} \right] \quad (\text{D.13})$$

defining the microstructure throughout the region  $\Omega_{\text{dev}}$ , being  $N$  the number of finite elements in  $\Omega_{\text{dev}}$ .

Finally, considering  $\mathbf{C} = \mathbf{C}(\mathbf{P})$  and  $\mathbf{K} = \mathbf{K}(\mathbf{P})$  in the balance equation (D.10), the temperature in  $\Omega$  at each time instant  $t > 0$  is a function of  $\mathbf{P}$ , i.e.  $\mathbf{T} = \mathbf{T}(\mathbf{P}, t)$ .

## 2.2. The transient heat flux manipulation problem

The material is assumed to obey the Fourier's Law, which defines the conductive heat flux in a continuous domain as

$$\mathbf{q} = -\mathbf{k}\nabla T. \quad (\text{D.14})$$

At the point  $\mathbf{x}$  inside the finite element  $\Omega^{(e)}$ , the heat flux is

$$\mathbf{q}(\mathbf{x}, t) = -\mathbf{k}(\mathbf{x})\mathbf{B}(\mathbf{x})\mathbf{T}(\mathbf{P}, t) = \mathbf{q}(\mathbf{P}, \mathbf{x}, t), \quad (\text{D.15})$$

with  $\mathbf{k}(\mathbf{x}) = \hat{\mathbf{k}}(\mathbf{p}^{(e)})$  if  $\Omega^{(e)} \subset \Omega_{\text{dev}}$ ; otherwise,  $\mathbf{k}(\mathbf{x})$  is a given thermal conductivity.

Now, the problem of designing a metadvice occupying the region  $\Omega_{\text{dev}} \subset \Omega$  to accomplish a transient heat flux manipulation task can be stated as follows: to find  $\mathbf{P}$  (i.e. the microstructure throughout  $\Omega_{\text{dev}}$ ) such

that

$$\mathbf{q}(\mathbf{P}, \mathbf{x}, t) = \bar{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t), \text{ for all } \mathbf{x} \in \Omega_{\text{task}} \text{ and } t \in (0, t_f), \quad (\text{D.16})$$

where  $\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t)$  is a prescribed heat flux to be achieved in the region  $\Omega_{\text{task}} \subset \Omega$  during the time interval  $(0, t_f)$ .

To make feasible the numerical solution of this problem, the accomplishment of the task is checked at  $H$  points  $\mathbf{x}^{(h)} \in \Omega_{\text{task}}$ . Further, the search of  $\mathbf{P}$  has to be constrained to an admissible design space  $\mathcal{D}$ . In general, the given task cannot be perfectly fulfilled under the constraint  $\mathbf{P} \in \mathcal{D}$ , and it is accomplished up to an error that can be defined as

$$f(\mathbf{P}) = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} g(\mathbf{P}, t) dt, \quad (\text{D.17})$$

where  $g$  is the root-mean square error in the accomplishment of the task at all the checking points at the instant  $t$ , given by

$$g(\mathbf{P}, t) = \left[ \frac{1}{H} \sum_{h=1}^H \left\| \mathbf{q}(\mathbf{x}^{(h)}, \mathbf{P}, t) - \bar{\mathbf{q}}(\mathbf{x}^{(h)}, t) \right\|^2 \right]^{1/2}. \quad (\text{D.18})$$

Finally, in order to accomplish the given transient heat flux manipulation task up to minimum error, the following nonlinear constrained optimization problem is solved:

$$\min_{\mathbf{P} \in \mathcal{D}} f(\mathbf{P}), \quad (\text{D.19})$$

where the function  $f$  defining the error in the accomplishment of the given transient task plays the role of objective function, and the microparameters  $P_i$  defining the microstructure distribution in the metadvice  $\Omega_{\text{dev}}$  are the design variables. Since there are  $M$  design variables per finite element in  $\Omega_{\text{dev}}$ , the optimization problem (D.19) is usually a large-scale problem.

Using the current approach, i.e. defining the transient heat flux manipulation task as the optimization problem (D.19), it is still possible to obtain a perfect design whenever the feasible design set  $\mathcal{D}$  is rich enough. If not, we will obtain a design for which the error in the accomplishment of the task reaches a minimum.

### 2.3. Sensitivity Analysis

The efficient solution of the optimization problem (D.19) requires the analytical computation of the objective function sensitivity to changes in the design variables, which is given by  $df/dP_i$ . Such a derivative can be computed using the adjoint method. To this end, the objective function (D.17) is rewritten as

$$f(\mathbf{P}) = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} g(\mathbf{P}, t) dt - \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{C}\dot{\mathbf{T}} + \mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{Q}) dt, \quad (\text{D.20})$$

where the additional term is null by virtue of the balance equation (D.6), and  $\boldsymbol{\lambda}$  is an arbitrary real vector to be determined.

Using integration by parts,  $f$  can be expressed as

$$f(\mathbf{P}) = \frac{1}{t_f} \left[ \int_0^{t_f} g(\mathbf{P}, t) dt - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{C}\mathbf{T} \Big|_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \mathbf{C}\mathbf{T} dt - \int_0^{t_f} \boldsymbol{\lambda} \cdot (\mathbf{K}\mathbf{T} - \mathbf{Q}) dt \right], \quad (\text{D.21})$$

and its derivative with respect to the  $i$ -th component of  $\mathbf{P}$  is

$$\begin{aligned} \frac{df}{dP_i} = \frac{1}{t_f} \left[ \int_0^{t_f} \left( \frac{\partial g}{\partial P_i} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} \cdot \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \right) dt - \boldsymbol{\lambda} \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \mathbf{T} \Big|_0^{t_f} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \mathbf{C} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \Big|_0^{t_f} + \int_0^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \mathbf{T} dt \right. \\ \left. + \int_0^{t_f} \dot{\boldsymbol{\lambda}} \cdot \mathbf{C} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} dt - \int_0^{t_f} \boldsymbol{\lambda} \cdot \left( \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T} + \mathbf{K} \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} \right) dt \right]. \quad (\text{D.22}) \end{aligned}$$

Taking  $d\mathbf{T}/dP_i = \mathbf{0}$  at  $t = 0$  and  $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$  at  $t = t_f$  (Chen y Tong, 2004, 2005), the above equation reduces to

$$\begin{aligned} \frac{df}{dP_i} = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \left( \mathbf{C}\dot{\boldsymbol{\lambda}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\lambda} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} \right) \cdot \frac{d\mathbf{T}}{dP_i} dt + \dots \\ \dots + \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \left[ \frac{\partial g}{\partial P_i} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \left( \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \dot{\mathbf{T}} + \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T} \right) \right] dt. \quad (\text{D.23}) \end{aligned}$$

In order to avoid the expensive computation of  $d\mathbf{T}/dP_i$ , the adjoint vector  $\boldsymbol{\lambda}$  is determined such that:

$$\mathbf{C}\dot{\boldsymbol{\lambda}} - \mathbf{K}\boldsymbol{\lambda} + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} = \mathbf{0}. \quad (\text{D.24})$$

This transient problem is time-integrated using an unconditionally stable implicit backward-difference scheme. Once  $\boldsymbol{\lambda}_{t+\Delta t}$  is known at time  $t + \Delta t$  (starting from  $\boldsymbol{\lambda} = \mathbf{0}$  at the final instant  $t = t_f$ ),  $\boldsymbol{\lambda}_t$  is determined by the equation

$$\mathbf{C} \frac{\boldsymbol{\lambda}_{t+\Delta t} - \boldsymbol{\lambda}_t}{\Delta t} - \mathbf{K}\boldsymbol{\lambda}_t + \frac{\partial g}{\partial \mathbf{T}} \Big|_t = \mathbf{0}. \quad (\text{D.25})$$

Using the so-computed  $\boldsymbol{\lambda}$ , Eq. (D.23) reduces to

$$\frac{df}{dP_i} = \frac{1}{t_f} \int_0^{t_f} \left[ \frac{\partial g}{\partial P_i} - \boldsymbol{\lambda} \cdot \left( \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \dot{\mathbf{T}} + \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T} \right) \right] dt. \quad (\text{D.26})$$

Finally, the sensitivity of the objective function is approximated using the standard trapezoidal rule for numerical integration:

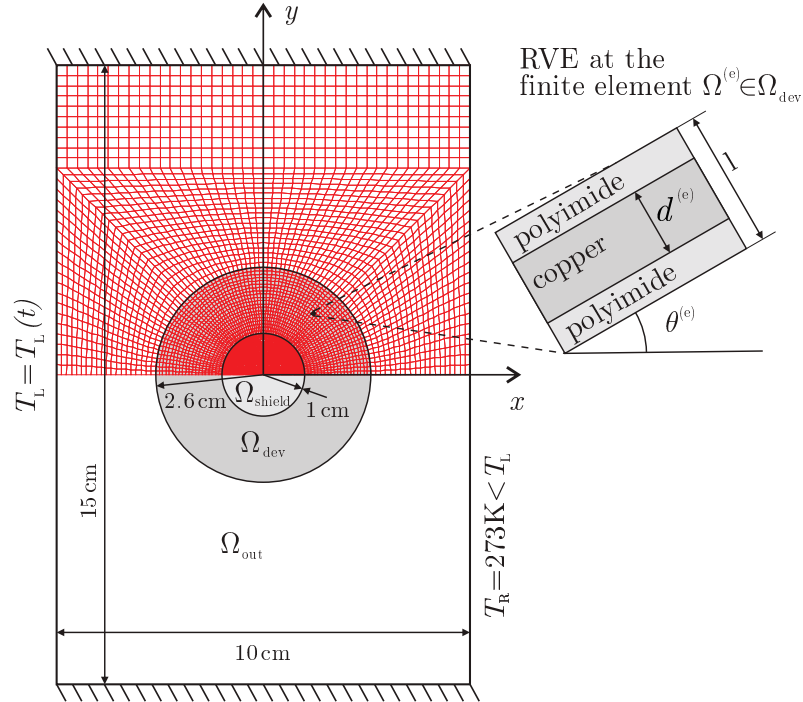
$$\begin{aligned} \frac{df}{dP_i} \approx \dots \\ \frac{\Delta t}{2 t_f} \sum_{j=1}^n \left[ \frac{\partial g_{t_j}}{\partial P_i} + \frac{\partial g_{t_{j-1}}}{\partial P_i} - (\boldsymbol{\lambda}_{t_j} + \boldsymbol{\lambda}_{t_{j-1}}) \cdot \frac{d\mathbf{C}}{dP_i} \frac{\mathbf{T}_{t_j} - \mathbf{T}_{t_{j-1}}}{\Delta t} - \boldsymbol{\lambda}_{t_j} \cdot \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T}_{t_j} - \boldsymbol{\lambda}_{t_{j-1}} \cdot \frac{d\mathbf{K}}{dP_i} \mathbf{T}_{t_{j-1}} \right]. \quad (\text{D.27}) \end{aligned}$$

### 3. Design of a device for transient heat flux manipulation

Let us apply the current optimization-based approach for the design of a heat flux shielding metadvice. The so-designed device will be compared to that designed by Narayana et al. (2013), whose thermal conductivity is intended to emulate that dictated by transformation thermodynamics, whereas the heat capacity was derived on the base of the authors intuition. Accordingly, the current heat transfer problem assumes the geometry, material properties and boundary conditions found in Narayana et al.'s problem.

The domain  $\Omega = \Omega_{\text{out}} \cup \Omega_{\text{shield}} \cup \Omega_{\text{dev}}$  and boundary conditions are depicted in Fig. D.2, and  $\Omega_{\text{task}} \equiv \Omega_{\text{shield}}$  is the region where the shielding task is prescribed. Advantage is taken from the symmetry with respect to the  $x$ -axis to mesh just the upper half of the domain  $\Omega$ .

The whole domain is assumed to be initially at temperature  $T_0 = 273$  K. For  $t > 0$ , the right wall temperature is  $T_R = 273$  K, whereas the left wall temperature is  $T_L = 313$  K until a first steady state is fully developed ( $t = 30000$  s is a time lage enough for this purpose), and it is increased to  $T_L = 323$  K just after that. Simulation ends at  $t_f = 60000$  s, when the steady state is reached again.



**Figure D.2:** Design of a thermal shield: domain  $\Omega = \Omega_{\text{out}} \cup \Omega_{\text{shield}} \cup \Omega_{\text{dev}}$ , boundary conditions and finite element mesh. On the right, representative volume element at the finite element  $\Omega^{(e)}$  in the device  $\Omega_{\text{dev}}$ .

The material filling  $\Omega_{\text{out}}$  and  $\Omega_{\text{shield}}$  is Sylgard Q3-3600, a silicone-based thermal conductive encapsulant with isotropic thermal conductivity  $k^{\text{sy1}} = 0.77 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  and volumetric heat capacity  $\rho c^{\text{sy1}} = 3.099 \text{ MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$ . For the metadvice, let us use a stacked composite or laminate made of alternating sheets of copper and polyimide. Although both materials are assumed to be isotropic, the laminate has an effective thermal conductivity that is generally anisotropic. Further, this anisotropy can be easily adjusted by changing the relative thickness of the constituents and the orientation of the anisotropy axes. This feature made such laminates widely used for guiding the heat flux (Peralta et al., 2017; Narayana y Sato, 2012;

Narayana et al., 2013; Vemuri et al., 2014). The laminate at the element  $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{dev}}$  is characterized by the relative thickness  $d^{(e)}$  of the copper sheets (that of the polyimide sheets is simply  $1 - d^{(e)}$ ), and the orientation of the laminate given by the angle  $\theta^{(e)}$  between the plane of the sheets and the  $x$ -axis, as depicted on the right of Fig. D.2.

Considering a Cartesian frame  $\lambda\tau$  with  $\lambda$  lying in the plane of the sheets and  $\tau$  normal to them, the components of the effective thermal conductivity at  $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{dev}}$  are (Kadic et al., 2013)

$$k_{\lambda\lambda}(d^{(e)}) = d^{(e)}k^{\text{cu}} + (1 - d^{(e)})k^{\text{pol}}, \quad (\text{D.28})$$

$$k_{\tau\tau}(d^{(e)}) = \left[ d^{(e)}/k^{\text{cu}} + (1 - d^{(e)})/k^{\text{pol}} \right]^{-1}, \quad (\text{D.29})$$

$$k_{\lambda\tau} = k_{\tau\lambda} = 0, \quad (\text{D.30})$$

being  $k^{\text{cu}} = 400 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  and  $k^{\text{pol}} = 0.17 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  the thermal conductivities of copper and polyimide, respectively. Referred to the fixed Cartesian frame  $xy$ , the components of the effective conductivity at  $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{dev}}$  are

$$k_{xx}(d^{(e)}, \theta^{(e)}) = k_{\lambda\lambda}(d^{(e)}) \cos^2 \theta^{(e)} + k_{\tau\tau}(d^{(e)}) \sin^2 \theta^{(e)}, \quad (\text{D.31})$$

$$k_{yy}(d^{(e)}, \theta^{(e)}) = k_{\lambda\lambda}(d^{(e)}) \sin^2 \theta^{(e)} + k_{\tau\tau}(d^{(e)}) \cos^2 \theta^{(e)}, \quad (\text{D.32})$$

$$k_{xy}(d^{(e)}, \theta^{(e)}) = k_{yx}(d^{(e)}, \theta^{(e)}) = \left[ k_{\lambda\lambda}(d^{(e)}) - k_{\tau\tau}(d^{(e)}) \right] \sin \theta^{(e)} \cos \theta^{(e)}. \quad (\text{D.33})$$

On the other hand, following (Guenneau et al., 2012; Liu et al., 2017; Ma et al., 2013; Kadic et al., 2013), the effective heat capacity at the finite element  $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{dev}}$  is defined by the linear mixture law

$$\rho c(d^{(e)}) = d^{(e)}\rho c^{\text{cu}} + (1 - d^{(e)})\rho c^{\text{pol}}, \quad (\text{D.34})$$

being  $\rho c^{\text{cu}} = 3.3495 \text{ MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$  and  $\rho c^{\text{pol}} = 1.526 \text{ MJm}^{-3}\text{K}^{-1}$  the heat capacities of copper and polyimide, respectively.

### 3.1. Definition of the optimization problem

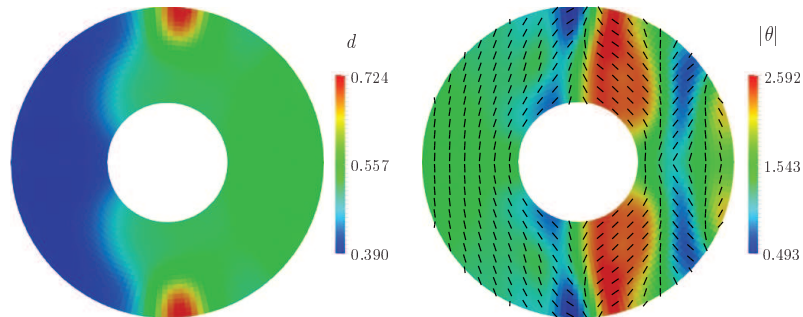
The current metadvice is designed by solving the optimization problem (D.19). The shielding task is specified by prescribing  $\bar{\mathbf{q}}(\bar{\mathbf{x}}^{(h)}, t) \equiv \mathbf{0}$  at the center  $\bar{\mathbf{x}}^{(h)}$  of each element in  $\Omega_{\text{shield}}$ . As design variables, for each element  $\Omega^{(e)} \in \Omega_{\text{dev}}$  we adopt  $P_{2e-1} \equiv d^{(e)}$  and  $P_{2e} \equiv \theta^{(e)}/\pi$ . Given these design variables, the optimization problem (D.19) is subject to the box constraints  $0 \leq P_i \leq 1$ . To avoid the well-known checkerboard-type instabilities that usually affect material distribution problems (Bendsøe y Sigmund, 2003), we use the density filtering technique proposed by Sigmund (2007). Such a strategy was proven to be successful for the design of metadvice either for heat transfer manipulation under steady-state (Peralta et al., 2017; Peralta y Fachinotti, 2017; Fachinotti et al., 2018a) and for elastostatic cloaking (Hostos et al., 2019; Fachinotti et al., 2018b).

Finally, the resulting nonlinear constrained large-scale optimization problem is solved using IPOPT, and the interior-point algorithm proposed by Wächter y Biegler (2006). IPOPT is a primal-dual barrier

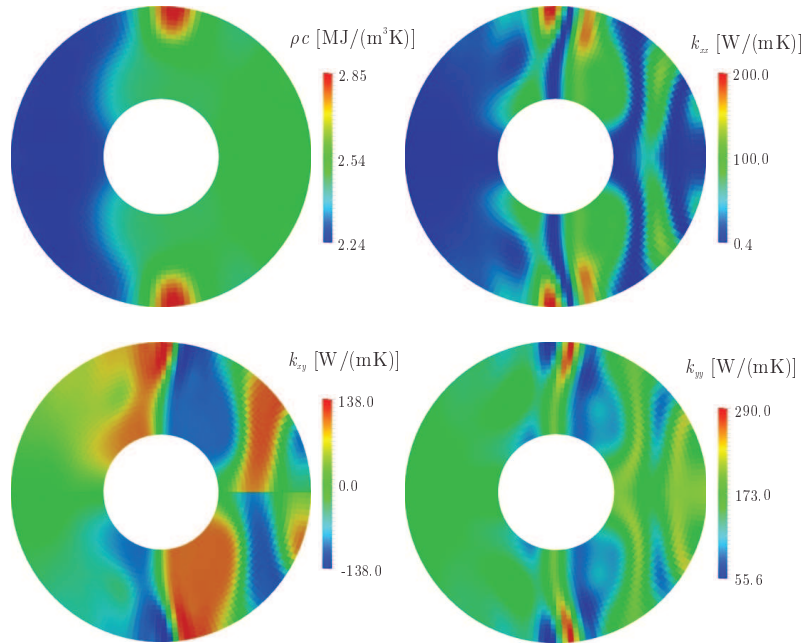
method that deals with the box constraints by introducing slack variables. It is particularly well suited for large-scale optimization problems, which was the main reason to be chosen for this work. Last but not least, IPOPT is released as an open source code that is freely available from the COIN-OR initiative (<https://projects.coin-or.org/Ipopt>).

## 4. Results and discussion

The solution of the optimization problem (D.19), after density filtering, is shown in Fig. D.3. Note that, although only the upper half was modeled invoking symmetry, the whole domain is shown for visualization purposes. For the heterogeneous microstructure in Fig. D.3, the effective conductivity and heat capacity fields are those shown in Fig. D.4. The metadvice having the so-determined microstructure, i.e. the optimal metadvice, accomplishes the task of shielding in  $\Omega_{\text{shield}}$  within the time interval  $(0, t_f)$  with an error  $f = 3.13 \text{ Wm}^{-2} = 9.15 \times 10^{-3} f_0$ , being  $f_0$  the error in absence of the metadvice.

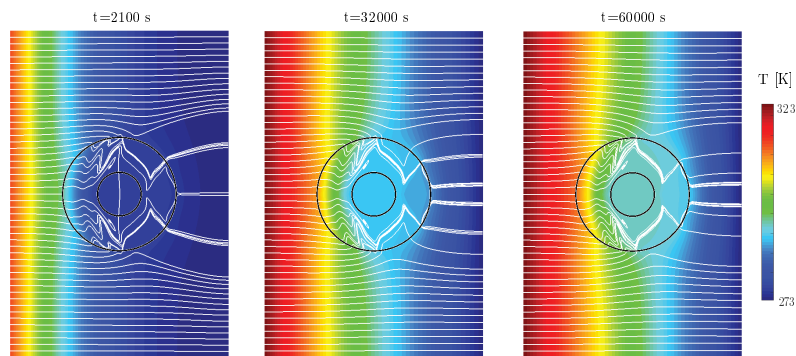


**Figure D.3:** Optimal metadvice for shielding in transient regime: relative thickness of copper ( $d$ ) and orientation of the laminates ( $|\theta|$ ).



**Figure D.4:** Optimal metadvice for shielding in transient regime: effective volumetric heat capacity  $\rho c$  and components  $k_{ij}$  of the thermal conductivity with respect to the  $xy$  frame.

Note that the present optimal device is not symmetric with respect to the  $y$ -axis. This can be explained by the fact that thermal gradients upstream  $\Omega_{\text{shield}}$  are higher than those downstream  $\Omega_{\text{shield}}$ , during the transient heat conduction process. Accordingly, the copper sheets are thin and the laminate is mainly oriented vertically upstream  $\Omega_{\text{shield}}$ , leading to the relatively low  $\rho c$  and negligible  $k_{xx}$  depicted in Fig. D.4. This particular distribution of thermal properties hinders the heat flow towards  $\Omega_{\text{shield}}$  despite the high thermal gradient upstream this region. Approaching  $\Omega_{\text{shield}}$ , the laminates are progressive reoriented tangent to the boundary of  $\Omega_{\text{shield}}$ , increasing  $k_{xy}$  and enforcing the heat to circumvent  $\Omega_{\text{shield}}$ . Downstream  $\Omega_{\text{shield}}$ , the copper layers are thick leading to an increase in heat capacity and thermal conductivity, and the laminates are reoriented to conduct the heat outside  $\Omega_{\text{dev}}$ .

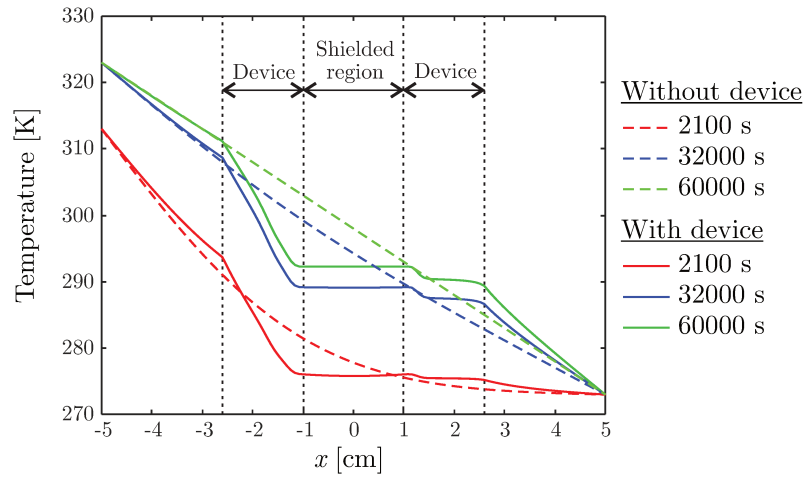


**Figure D.5:** Optimal metadvice for shielding in transient regime: temperature and heatlines in the whole plate at different time instants.

The effect of the metadvice on the temperature field throughout  $\Omega$  is shown in Fig. D.5. The heat flux in presence of the metadvice during the transient heat conduction process is remarkably different from



the one-dimensional heat flux inherent to the homogeneous plate (i.e. without the device). The way the metadvice guides the heat flux out of  $\Omega_{\text{shield}}$  can be realized by simple inspection of the heatlines in Fig. D.5, which clearly circumvent  $\Omega_{\text{shield}}$ .

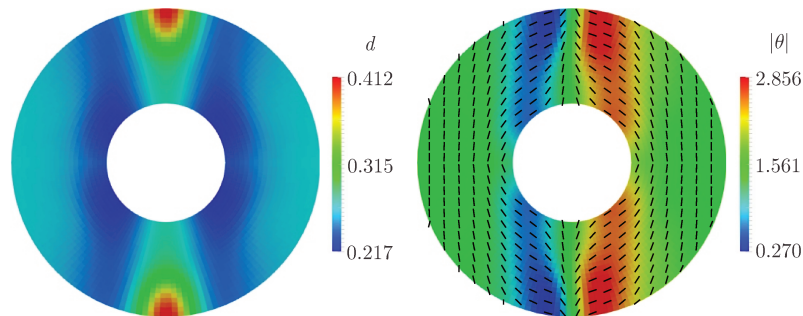


**Figure D.6:** Optimal metadvice for shielding in transient regime: Temperature along the  $x$ -axis (symmetry axis) at different instants, comparing with the case of the homogeneous plate (without device).

Together with the heat flux, the temperature in  $\Omega_{\text{shield}}$  was significantly reduced during the whole process thanks to the metadvice, as it can be seen in Fig. D.6.

#### 4.1. On the importance of designing for transient regime

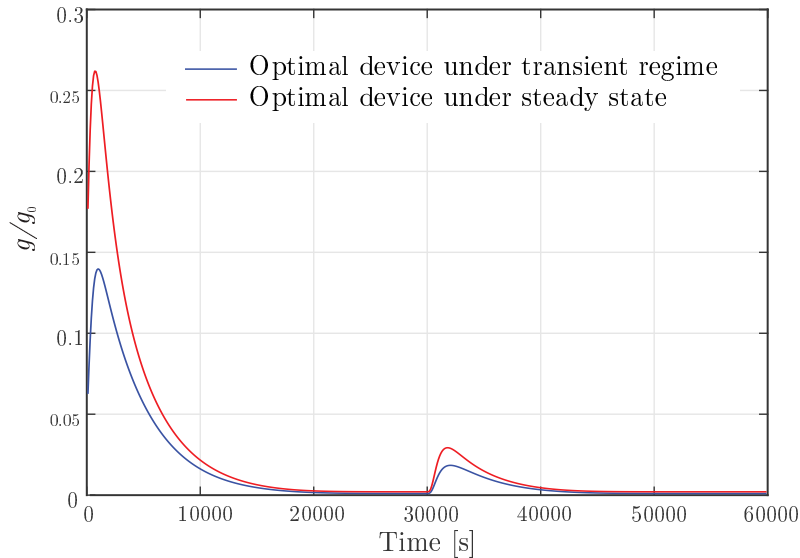
Now, let us compare the optimal metadvice specifically designed for transient regime, to another optimization-based metadvice where the shielding task is prescribed in the steady state. To this end, we use the optimization-based formulation particularly developed for heat flux manipulation in the steady state (Peralta et al., 2017; Fachinotti et al., 2018a; Peralta y Fachinotti, 2017).



**Figure D.7:** Optimal metadvice for shielding in steady state: relative thickness of copper ( $d$ ) and orientation of the laminates ( $|\theta|$ ).

The material distribution in the metadvice conceived for shielding in steady state is shown in Fig. D.7. The implementation of the so-designed metadvice to perform the transient shielding task leads to an error  $f = 5.31 \text{ Wm}^{-2}$ , which is 1.70 times the error achieved with the optimal metadvice specifically designed for the transient regime. Note that the metadvice designed under steady conditions is symmetric

with respect to the  $y$ -axis, as it is also the case for the Narayana et al.'s metadvice. Given this symmetry, the performance of these metadvice is severely affected by the high thermal gradients developed upstream  $\Omega_{\text{dev}}$  during the first stages of the transient heat conduction process, which could explain why they perform worse than the metadvice specifically optimized for shielding in the transient regime.



**Figura D.8:** Evolution of the instantaneous error  $g$  in the accomplishment of the transient shielding task using either the metadvice specifically designed for transient regime or that designed for the steady state, related to the error  $g_0$  for the case of the homogeneous plate.

The instantaneous error in the accomplishment of the transient shielding task is shown in Fig. D.8, which exhibits the superior performance of the metadvice specifically designed for transient shielding all along the process and more markedly in the first stages of heating.

**Figura D.9:** Evolution of the temperature at the center of the shielded region from the start of the second heating stage ( $t_1 = 30000$  s). [Figure 9 near here]

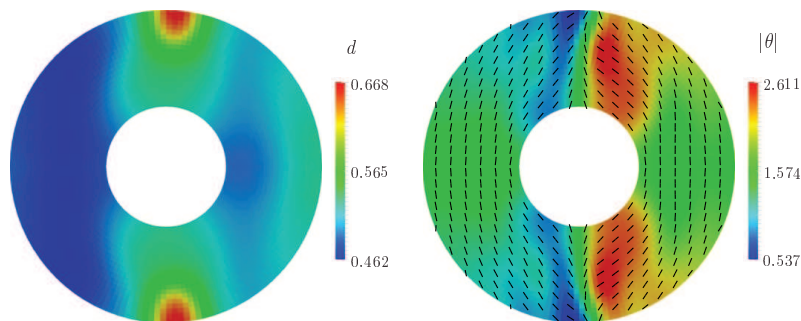
Narayana et al. (2013) did not reported data to complete the above comparison. They measured the performance of their shielding device in terms of the temperature increment  $\Delta T$  at the center of  $\Omega_{\text{shield}}$  from the beginning of the second heating stage, i.e. from  $t_1 = 30000$  s. This is shown in Fig. D.9, together with the curves corresponding to the plate either without any shielding device or with the optimization-based thermal metadvice. Note that the heating rate using the device designed to be optimal in the transient regime is slightly higher than that achieved with Narayana et al.'s device at the first stages of heating, but it is considerably lower after that. Actually, when the steady state is fully developed,  $\Delta T = 5$  K with the Narayana et al.'s device, which is the same as that for the homogeneous plate. On the other hand,  $\Delta T = 3.68$  K when using the metadvice specifically designed to be optimal in transient regime. Regarding the metadvice designed to be optimal at the steady state,  $\Delta T = 5.12$  K, i.e. slightly higher than the case without device. Anyway, let us remind that the current objective function aimed to represent the shielding task was not  $\Delta T$ . However, to take  $\Delta T$  as objective function is straightforward using the current optimization-based

approach.

## 5. Application to multiple tasks

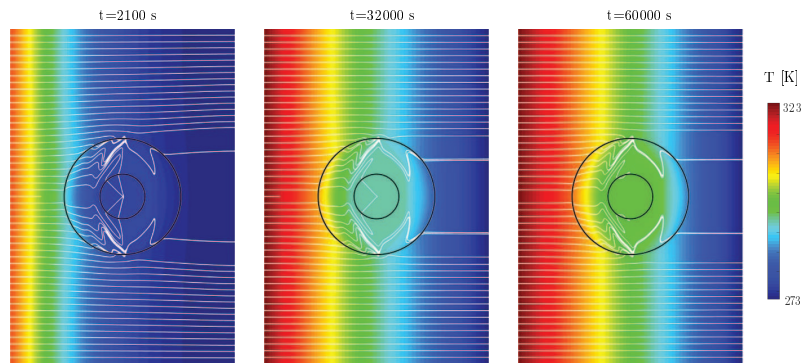
The application of the current approach to accomplish different heat flux manipulation tasks in transient regime is straightforward. Actually, it suffices to change the input data, under the external flux  $\mathbf{q}_{\text{ext}}$ . For instance, concentration at the point  $\mathbf{x}$  amounts to prescribe  $\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t) = \alpha \mathbf{q}_{\text{ext}}$  with  $\alpha > 1$ , whereas heat flux inversion at  $\mathbf{x}$  is simply prescribed by setting  $\alpha = -1$ . Finally, for the simultaneous accomplishment of different tasks in the portions  $\Omega_{\text{task}}^{(1)}$ ,  $\Omega_{\text{task}}^{(2)}$ ,  $\dots$  of  $\Omega_{\text{task}}$ , one just have to prescribe the desired  $\bar{\mathbf{q}}(\mathbf{x}, t)$  at the checking points in  $\Omega_{\text{task}}^{(i)}$ .

As an example, starting from the example of transient shielding addressed in the previous section, let us add the task of cloaking the heat task in the domain  $\Omega_{\text{out}}$  outside the metadvice. This is simply achieved by prescribing  $\bar{\mathbf{q}}(\bar{\mathbf{x}}^{(h)}, t) = \mathbf{0}$  at the centers of the elements in  $\Omega_{\text{shield}}$ , and  $\bar{\mathbf{q}}(\bar{\mathbf{x}}^{(h)}, t) = \mathbf{q}_{\text{hom}}(\bar{\mathbf{x}}^{(h)}, t)$  at the centers of the elements in  $\Omega_{\text{out}}$ , being  $\mathbf{q}_{\text{hom}}$  the heat flux field in the homogeneous plate.



**Figure D.10:** Optimal metadvice for shielding and cloaking in transient regime: relative thickness of copper ( $d$ ) and orientation of the laminates ( $|\theta|$ ).

The material distribution in the so-designed optimal cloaking and shielding device is shown in Fig. D.10. The metadvice with such material distribution performs the combined cloaking and shielding task up to an error of  $f = 4.60 \text{ Wm}^{-2}$ . Applied to shielding only, the error is  $f = 4.46 \text{ Wm}^{-2} = 13.04 \times 10^{-3} f_0$ , which is 1.425 times the error for the metadvice specifically conceived for transient shielding, but it is 0.84 times the error achieved when using the metadvice designed for steady shielding. In other words, the optimal cloaking and shielding device does not exhibit a performance on the shielding task as good as that achieved with the metadvice specifically designed for such a purpose in transient regime, but it still performs better than the shielding device designed under steady conditions.



**Figura D.11:** Optimal metadvice for shielding and cloaking in transient regime: temperature and heatlines in the whole plate at different time instants.

The effect of this metadvice on the temperature field throughout  $\Omega$  is shown in Fig. D.11. The heatlines outside  $\Omega_{\text{dev}}$  are practically unaltered, denoting the good accomplishment of the cloaking task. The thermal gradients in the  $\Omega_{\text{shield}}$  are weak, denoting the good accomplishment of the shielding task, although they are not as weak as those achieved with the metadvice specifically designed for transient shielding (Fig. D.5) at the first stages of heating. In our previous works on metadvice design for heat flux manipulation in the steady regime (Fachinotti et al., 2018a) and elastostatic cloaking (Fachinotti et al., 2018b; Hostos et al., 2019), it has already been demonstrated that a metadvice designed for multiple tasks works poorly when comparing its performance on a single task, with another device that has been specifically conceived to accomplish such a task. This supports another crucial advantage of the optimization-based procedure compared to the transformation-based approach, where cloaking outside the device is always forced irrespectively of the given task.

## 6. Conclusions

A novel approach for the design of thermal metadvice conceived to manipulate the heat flux under transient conditions has been introduced. It involves minimizing an objective function defining a given heat flux manipulation task (including shielding, cloaking, concentration, inversion, etc.) that is prescribed along a time period during the transient process. This is done by solving a large-scale nonlinear constrained optimization problem, whose design variables determine the inhomogeneous material distribution.

The advantages of this method were demonstrated via the design of a shielding device as alternative to another designed by using the classical transformation-based approach and intuition. The metadvice designed under the optimization-based approach better accounts for the transient effects via an unsymmetric material distribution thought to preserve the shielding region from high thermal gradients on one side and to diffuse the heat absorbed in this on the other side. Actually, the lack of symmetry was shown to be a consequence of considering transient effects rather than of the design method, since it is not observed in a device designed under the same optimization-based procedure but assuming that the shielding task is prescribed in the steady state.

Finally, the versatility of the proposed approach to design metadvice for multiple heat flux manipu-

lation tasks was proven by designing a device for simultaneous cloaking and shielding in transient regime. Results from this example has proven that if the given task is other than cloaking, the collateral fulfillment of the cloaking task outside the device (as in the case of solutions obtained under the transformation-based approach) is detrimental to the main purpose.

Although the realizability of the so-determined metamaterial at each point of the metadvice is guaranteed by the constraints added to the optimization problem, we plan to make further efforts towards manufacturability with the final aim of incorporating the current methodology into a computed-aided engineering tool for 3D printers.

## References

- Bendsøe M.P. y Sigmund O. *Topology optimization. Theory, methods, and applications*. Springer-Verlag, 2003.
- Chen B. y Tong L. Sensitivity analysis of heat conduction for functionally graded materials. *Materials & Design*, 25(8):663–672, 2004. doi:10.1016/j.matdes.2004.03.007.
- Chen B. y Tong L. Thermomechanically coupled sensitivity analysis and design optimization of functionally graded materials. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 194(18-20):1891–1911, 2005. doi:10.1016/j.cma.2004.07.005.
- Chen J., Rungsiyakull C., Li W., Chen Y., Swain M., y Li Q. Multiscale design of surface morphological gradient for osseointegration. *Journal of the Mechanical Behavior of Biomedical Materials*, 20:387–397, 2013. doi:10.1016/j.jmbbm.2012.08.019.
- Dede E.M. Simulation and optimization of heat flow via anisotropic material thermal conductivity. *Computational Materials Science*, 50:510–515, 2010.
- Dede E.M., Nomura T., y Lee J. Thermal-composite design optimization for heat flux shielding, focusing, and reversal. *Struct. Multidisc. Optim.*, 49:59–68, 2014.
- Fachinotti V.D., Ciarbonetti Á.A., Peralta I., y Rintoul I. Optimization-based design of easy-to-make devices for heat flux manipulation. *International Journal of Thermal Sciences*, 128:38–48, 2018a. doi:10.1016/j.ijthermalsci.2018.02.009.
- Fachinotti V.D., Peralta I., y Albanesi A.E. Optimization-based design of an elastostatic cloaking device. *Scientific Reports*, 8(1), 2018b. doi:10.1038/s41598-018-28069-7.
- Fachinotti V.D., Toro S., Sánchez P.J., y Huespe A.E. Sensitivity of the thermomechanical response of elastic structures to microstructural changes. *International Journal of Solids and Structures*, 69-70:45–59, 2015. doi:10.1016/j.ijsolstr.2015.06.009.
- Guenneau S., Amra C., y Veynante D. Transformation thermodynamics: cloaking and concentrating heat flux. *Optics Express*, 20(7):8207, 2012. doi:10.1364/oe.20.008207.
- Ha S.H. y Cho S. Level set-based topological shape optimization of nonlinear heat conduction problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 54(6):454–475, 2008. doi:10.1080/10407790802483408.
- Haghighi M.R.G., Malekzadeh P., Rahideh H., y Vaghefi M. Inverse transient heat conduction problems of

- a multilayered functionally graded cylinder. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 61(9):717–733, 2012. doi:10.1080/10407782.2012.671017.
- Hesami H. y Mayeli P. Development of the ball-spine algorithm for the shape optimization of ducts containing nanofluid. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 70(12):1371–1389, 2016. doi:10.1080/10407782.2016.1243976.
- Hostos J.C.Á., Fachinotti V.D., y Peralta I. Metamaterial for elastostatic cloaking under thermal gradients. *Scientific Reports*, 9(1), 2019. doi:10.1038/s41598-019-40517-6.
- Hung T.C., Huang Y.X., Sheu T.S., y Yan W.M. Numerical optimization of the thermal performance of a porous-microchannel heat sink. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 65(5):419–434, 2013. doi:10.1080/10407782.2013.836005.
- Kachanov M. y Sevostianov I. On quantitative characterization of microstructures and effective properties. *International Journal of Solids and Structures*, 42(2):309–336, 2005. doi:10.1016/j.ijsolstr.2004.06.016.
- Kadic M., Bückmann T., Schittny R., y Wegener M. Metamaterials beyond electromagnetism. *Rep. Prog. Phys.*, 76:126501, 2013.
- Li Y., Shen X., Huang J., y Ni Y. Temperature-dependent transformation thermotics for unsteady states: Switchable concentrator for transient heat flow. *Physics Letters A*, 380(18-19):1641–1647, 2016. doi:10.1016/j.physleta.2016.02.040.
- Liu Y., Guo W., y Han T. Arbitrarily polygonal transient thermal cloaks with natural bulk materials in bilayer configurations. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 115:1–5, 2017. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.07.032.
- Long K., Wang X., y Gu X. Multi-material topology optimization for the transient heat conduction problem using a sequential quadratic programming algorithm. *Engineering Optimization*, 50(12):2091–2107, 2018. doi:10.1080/0305215x.2017.1417401.
- Lund E. y Stegmann J. On structural optimization of composite shell structures using a discrete constitutive parametrization. *Wind Energy*, 8(1):109–124, 2005.
- Ma Y., Lan L., Jiang W., Sun F., y He S. A transient thermal cloak experimentally realized through a rescaled diffusion equation with anisotropic thermal diffusivity. *NPG Asia Materials*, 5(e73):1–6, 2013. doi:10.1038/am.2013.60.
- Narayana S. y Sato Y. Heat flux manipulation with engineered thermal materials. *Physical Review Letters*, 108:214303–214308, 2012.
- Narayana S., Savo S., y Sato Y. Transient heat flux shielding using thermal metamaterials. *Applied Physics Letters*, 102(20):201904, 2013. doi:10.1063/1.4807744.
- Nithiarasu P., Lewis R.W., y Seetharamu K.N. *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Mass Transfer*. John Wiley and Sons Ltd, 2016. ISBN 047075625X.
- Nocedal J. y Wright S.J. *Numerical Optimization*. Springer, 2nd edición, 2006.
- Pendry J.B., Schurig D., y Smith D.R. Controlling electromagnetic fields. *Science*, 312(5781):1780–1782, 2006.
- Peralta I. y Fachinotti V.D. Optimization-based design of heat flux manipulation devices with emphasis on fabricability. *Scientific Reports*, 7(1), 2017. doi:10.1038/s41598-017-06565-6.

- Peralta I., Fachinotti V.D., y Ciarbonetti Á.A. Optimization-based design of a heat flux concentrator. *Scientific Reports*, 7(1), 2017. doi:10.1038/srep40591.
- Pizzolato A., Sharma A., Maute K., Sciacovelli A., y Verda V. Topology optimization for heat transfer enhancement in latent heat thermal energy storage. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 113:875–888, 2017. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.05.098.
- Rahideh H., Malekzadeh P., Haghghi M.R.G., y Vaghefi M. Two-dimensional inverse transient heat conduction analysis of laminated functionally graded circular plates. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 62(12):992–1014, 2012. doi:10.1080/10407782.2012.715987.
- Schittny R., Kadic M., Guenneau S., y Wegener M. Experiments on transformation thermodynamics: Molding the flow of heat. *Physical Review Letters*, 110(19), 2013. doi:10.1103/physrevlett.110.195901.
- Siavashi M., Garusi H., y Derakhshan S. Numerical simulation and optimization of steam-assisted gravity drainage with temperature, rate, and well distance control using an efficient hybrid optimization technique. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 72(9):721–744, 2017. doi:10.1080/10407782.2017.1400330.
- Sigmund O. Morphology-based black and white filters for topology optimization. *Struct. Multidisc. Optim.*, 33:401–424, 2007.
- Tortorelli D.A. y Michaleris P. Design sensitivity analysis: Overview and review. *Inverse Problems in Engineering*, 1(1):71–105, 1994.
- Vemuri K.P., Canbazoglu F.M., y Bandaru P.R. Guiding conductive heat flux through thermal metamaterials. *Applied Physics Letters*, 105(19):193904, 2014. doi:10.1063/1.4901885.
- Wächter A. y Biegler L.T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Math. Program., Ser. A*, 106:25–57, 2006.
- Wu C.H., Tang H.W., y Yang Y.T. Numerical simulation and optimization of turbulent flows through perforated circular pin fin heat sinks. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 71(2):172–188, 2017. doi:10.1080/10407782.2016.1264727.
- Xie G., Song Y., y Sundén B. Computational optimization of the internal cooling passages of a guide vane by a gradient-based algorithm. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 69(12):1311–1331, 2016. doi:10.1080/10407782.2016.1139920.
- Xu G., Zhang H., Zou Q., y Jin Y. Predicting and analyzing interaction of the thermal cloaking performance through response surface method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 109:746–754, 2017. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.02.056.
- Yan S., Wang F., y Sigmund O. On the non-optimality of tree structures for heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 122:660–680, 2018. doi:10.1016/j.ijheatmasstransfer.2018.01.114.
- Yang Y.T., Tsai K.T., Tang H.W., y Chung S.E. Numerical simulations and optimization of porous pin fins in a rectangular channel. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 70(7):791–808, 2016. doi:10.1080/10407782.2016.1214479.
- Yuan X.B., Lin G.C., y Wang Y.S. Influence of nonlinear coordinate transformation on thermal cloaking performances of multilayered cylindrical thermal cloaks. *AIP Advances*, 6(4):045013, 2016. doi:10.1063/1.4948261.

- Zhang X. y Jaluria Y. Optimization of microchannel-based cooling systems. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications*, 74(3):1053–1067, 2018. doi:10.1080/10407782.2018.1513285.
- Zhang Y., Xu H., y Zhang B. Design, implementation, and extension of thermal invisibility cloaks. *AIP Advances*, 5(5):053402, 2015. doi:10.1063/1.4913996.
- Zhou M., Alexandersen J., Sigmund O., y Pedersen C.B.W. Industrial application of topology optimization for combined conductive and convective heat transfer problems. *Structural and Multidisciplinary Optimization*, 54(4):1045–1060, 2016. doi:10.1007/s00158-016-1433-2.
- Zhuang C. y Xiong Z. A global heat compliance measure based topology optimization for the transient heat conduction problem. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 65(5):445–471, 2014. doi:10.1080/10407790.2013.873309.
- Zhuang C. y Xiong Z. Temperature-constrained topology optimization of transient heat conduction problems. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 68(4):366–385, 2015. doi:10.1080/10407790.2015.1033306.
- Zhuang C., Xiong Z., y Ding H. Topology optimization of the transient heat conduction problem on a triangular mesh. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals*, 64(3):239–262, 2013. doi:10.1080/10407790.2013.791785.