

ANÁLISIS COMPUTACIONAL DE LA FUENTE TÉRMICA EQUIVALENTE EN UN PROBLEMA ACOPLADO DE CALENTAMIENTO REMOTO

COMPUTATIONAL ANALYSIS OF THE EQUIVALENT THERMAL SOURCE IN A COUPLED REMOTE HEATING PROBLEM

Lautaro Ginóbili^a, Fernando A. Otero^a

^a*Grupo de Matemática Aplicada a Ingeniería, Universidad Nacional de Mar del Plata, Juan B. Justo
4302, 7600 Mar del Plata, Argentina, foterovega@fi.mdp.edu.ar, ginobililautaro@gmail.com*

Palabras clave: Optimización Basada en Simulación, Transferencia de Calor, Transferencia Radiativa, Cuantificación de Incertezas.

Resumen. El efecto fototérmico debido a la resonancia plasmónica de superficie tiene varias aplicaciones interesantes en campos como la optoelectrónica, la fotónica, y la nanotecnología. Sin embargo, su uso plantea el análisis de la multifísica de problemas térmico-radiativos acoplados de gran complejidad, tanto en términos teóricos como computacionales, que sólo pueden resolverse en forma aproximada. Este trabajo investiga la cuantificación de incertezas proveniente de los errores de modelado en una fuente térmica equivalente para un problema de calentamiento remoto acoplado, sobre un nanocompuesto con nanopartículas de oro. Como punto de partida se explora un modelo simplificado para una barra unidimensional infinita y se estudia su alcance en la práctica, para luego enfocar el análisis en resultados numéricos hallados mediante la optimización basada en simulación. Específicamente, se analiza el impacto de modelar una fuente térmica equivalente en el perfil de temperaturas y especialmente en la caracterización térmica del material, estudiando asimismo la sensibilidad de la fuente a parámetros de diseño del nanocompuesto.

Keywords: Simulation-Based Optimization, Heat Transfer, Radiative Transfer, Uncertainty Quantification.

Abstract. The photothermal effect due to surface plasmon resonance has several interesting applications in fields such as optoelectronics, photonics, and nanotechnology. However, its use raises the analysis of the multiphysics of coupled thermal-radiative problems of great complexity, both in theoretical and computational terms, which can only be approximately resolved. This work investigates the uncertainty quantification arising from modeling errors in an equivalent thermal source for a coupled remote heating problem, on a nanocomposite with gold nanoparticles. As a starting point, a simplified model for an infinite one-dimensional bar is explored and its practical scope is studied, before focusing the analysis on numerical results found through simulation-based optimization. Specifically, the impact of modeling an equivalent thermal source on the temperature profile is analyzed, with particular focus on the thermal characterization of the material. Additionally, the sensitivity of the source to the design parameters of the nanocomposite is also studied.

INTRODUCCIÓN

Los modelos reducidos juegan un papel crucial en la resolución de problemas térmico-radiativos de multifísica al ofrecer un enfoque efectivo para capturar el comportamiento complejo de sistemas que involucran diversas interacciones multiescala. Estos modelos simplificados se diseñan para representar de manera precisa los fenómenos clave mientras reducen la carga computacional y los requisitos de recursos, lo que los hace especialmente útiles en aplicaciones donde se busca un equilibrio entre precisión y eficiencia computacional. En este contexto es necesario realizar además, un estudio de factibilidad y alcance en el uso de los mismos, esto es, analizar bajo qué condiciones estos modelos permiten abordar los problemas con mayor rapidez y economía, sin comprometer significativamente la calidad de los resultados. Asimismo, cuando no se dispone de una forma analítica del modelo completo, la optimización basada en simulación se convierte en una herramienta invaluable para explorar y mejorar el rendimiento de los sistemas acoplados. Mediante técnicas de optimización de diverso tipo, como algoritmos genéticos, métodos de Monte Carlo u optimización basada en gradientes, se puede ajustar y refinar los parámetros del modelo reducido para maximizar su precisión y eficiencia. Estos enfoques permiten encontrar soluciones óptimas en un espacio de diseño complejo y multidimensional, optimizando el rendimiento del sistema y satisfaciendo restricciones específicas. Además, la capacidad de integrar la simulación con la optimización abre nuevas posibilidades para la exploración de diseños innovadores y la mejora continua del rendimiento en aplicaciones.

En este trabajo, el problema de multifísica en cuestión es el que surge del proceso de calentamiento remoto por efecto fototérmico de resonancia plasmónica en sistemas poliméricos nanocompuestos con nanopartículas (NP) de oro esféricas y de tipo nanoshell (compuestas por un núcleo y una coraza). Nos concentramos en modelos bidimensionales tomando como referencia, en primera instancia resultados simulados con un acoplamiento fuerte o bidireccional, donde el análisis computacional correspondiente se refiere al ajuste de mediciones de temperatura mediante el uso de una fuente de calor equivalente en el problema térmico desacoplado obtenida a partir de la solución analítica para el caso de una barra infinita unidimensional en [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#). Se analiza entonces mediante este ajuste, el sesgo introducido en los valores medios de los parámetros térmicos, así como el propio error en la fuente de calor respecto de la solución óptima de mínimos cuadrados. Este trabajo viene a complementar el análisis inicial de este problema realizado en [Otero et al \(2015\)](#), así como a contribuir en términos de resultados numéricos al estudio realizado en trabajos posteriores como en [Otero et al \(2019\)](#) y [Otero et al \(2022\)](#). El aporte específico de este trabajo radica en la resolución del problema mediante un esquema de acoplamiento fuerte, en principio para generar mediciones de temperatura de referencia con mayor exactitud con el fin de volver a estudiar el alcance en el uso de una fuente de calor equivalente, así como para resolver el problema inverso en casos simulados y comparar los resultados obtenidos con los hallados mediante el modelo térmico reducido, así como con los valores de referencia.

1 BREVE DESCRIPCIÓN DEL PROBLEMA

El denominado efecto fototérmico debido a la resonancia plasmónica de superficie, presente en metales como el oro y la plata, ocurre cuando la frecuencia de la luz incidente coincide con la frecuencia natural de oscilación de los denominados plasmones de superficie que se encuentran en NP en la interfaz entre el metal de su núcleo y el dieléctrico que lo rodea. Al ocurrir este fenómeno, se produce un aumento dramático en la absorción y dispersión de la luz en la superficie metálica de las NP. El fenómeno entonces da lugar a un problema de calentamiento del material nanocompuesto, donde estas NP, típicamente de oro,

definen el patrón de dicho calentamiento de acuerdo a sus características, como su tipo, concentración y tamaño por ejemplo. Es decir, estamos en presencia de un problema de multifísica, donde se acoplan un problema radiativo definido principalmente por las propiedades ópticas de las NP y otro térmico que es analizado en una escala mayor.

El problema descrito en el párrafo anterior puede modelarse a través de la resolución acoplada de la ecuación de transferencia radiativa (RTE) y la ecuación de transferencia de calor (HTE) que corresponden en su forma más genérica a la Ecs. (1) y (2), respectivamente (Modest, 2013)

$$\Omega \nabla I(\Omega) = \kappa_a I_b(T) - \beta I(\Omega) + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi} I(\Omega') \phi(\Omega', \Omega) d\Omega', \quad (1)$$

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} + \nabla(-k \nabla T) = Q_r \quad (2)$$

donde $I(\Omega)$ es la intensidad radiativa en la dirección del ángulo sólido Ω ; κ_a es el coeficiente de absorción; $I_b(T)$ es la llamada intensidad radiativa del cuerpo negro, dependiente de la temperatura T ; β es el coeficiente de extinción; σ_s es el coeficiente de scattering y $\phi(\Omega', \Omega)$ hace referencia a la función de fase de scattering. Por otro lado, en la ETC, ρ es la densidad del material, C_p es el calor específico, k es la conductividad térmica y Q_r es la fuente de calor radiativa equivalente que viene dada en este caso por el efecto fototérmico.

Para modelar adecuadamente el acoplamiento entre la RTE y la HTE, es crucial considerar la interacción bidireccional de cómo la absorción de radiación afecta la distribución de temperatura y cómo la temperatura a su vez afecta la emisión y absorción de radiación. Sin embargo, la resolución directa de estas dos ecuaciones acopladas en su versión más general, y particularmente la RTE, es de un costo computacional impracticable en la mayoría de los casos. Como consecuencia han aparecido varias aproximaciones en primer lugar, para resolver la RTE y en segundo, para desacoplar las ecuaciones (1) y (2). En este trabajo, la RTE es abordada mediante la llamada aproximación P1 que resuelve la Ec. (3)

$$G = \int_{4\pi} I(\Omega) d\Omega, \quad (3)$$

$$\nabla(-D_{p1} \nabla G) = -\kappa_a (G - 4\pi I_b)$$

donde D_{p1} es el denominado coeficiente de difusión P1 y que si se modela un medio isotrópico se reduce a $D_{p1} = 1/(3\kappa_a + 3\sigma_s)$.

Por otra parte, Tjahjono y Bayazitoglu (2008) han empleado la aproximación P1 para resolver el problema 1D de una barra infinita, logrando para este caso específico, desacoplar las Ecs. (1)-(2). Para ello, los autores resolvieron la Ec. (3), y desarrollaron un procedimiento para obtener Q_r a partir de la conexión con G dada en la Ec. (4)

$$Q_r = -(1 - \omega) \beta G \quad (4)$$

donde ω es el denominado albedo, introducido para definir el cociente entre los coeficientes de absorción y extinción, es decir $\omega = \sigma_s / \beta$

Se recomienda al lector interesado en una descripción detallada del procedimiento para el cálculo de Q_r , la lectura de [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#).

2 ESTUDIO REALIZADO: FORMULACIÓN Y METODOLOGÍA

El problema del estudio de alcance de la solución para la fuente térmica equivalente calculada para el modelo 1D ha sido abordado en este trabajo considerando mediciones simuladas del problema acoplado de una barra bidimensional. Este problema acoplado se resuelve de manera bidireccional empleando la aproximación P1 para el tratamiento numérico de la RTE. En este modelo 2D de referencia, se verifica una diferencia de un orden de magnitud entre la dimensión característica respecto de las otras dos, de modo de asemejar en términos geométricos a la barra unidimensional infinita. Del mismo modo, se supone el cumplimiento de las hipótesis físicas planteadas en [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#).

En términos generales podemos analizar el alcance de un modelo dependiendo de la aplicación en que se va a emplear y mediante varias cuestiones centrales como son (entre otras): 1) su precisión; 2) la sensibilidad a las condiciones iniciales y de contorno; 3) su estabilidad y 4) su robustez frente a perturbaciones. En este trabajo, analizamos algunas de estas cuestiones implícitamente a través del planteo de varios problemas, considerados desde tres puntos de vista: como problemas directos, como problemas inversos y como problemas de cuantificación de incertezas. Estos problemas han sido planteados teniendo en cuenta las dos utilidades que se pretenden del modelo, i) diseñar a partir del mismo las características de las NP para el material nanocompuesto, y ii) recuperar los parámetros térmicos del material resolviendo el problema inverso de caracterización térmica. Específicamente, los problemas planteados como problemas directos son: a) la propagación de errores para que el contorno de entrada de radiación llegue a un valor de temperatura determinado; b) el cálculo de discrepancia en la serie temporal de temperaturas en un punto de sensado y c) la propagación de errores de los valores de los parámetros de diseño del problema como es el radio de las NP en el perfil temporal de temperaturas. En tanto que los problemas inversos planteados corresponden a: d) la estimación de la fuente de calor parametrizada y e) la caracterización térmica del material a través del cálculo de valores medios de conductividad térmica y la capacidad calorífica. Finalmente planteamos como problema de cuantificación de incertezas a f) la propagación de errores de los valores de los parámetros de diseño del problema sobre los parámetros de la caracterización térmica. Estos problemas tienen en cuenta como resultados de referencia a los hallados mediante el modelo acoplado en 2D

Por limitaciones en la longitud del trabajo, sólo se describen en las subsecciones siguientes, el problema directo a) (en el análisis preliminar); los problemas inversos d) y e) (en la estimación de la fuente térmica equivalente parametrizada; y la caracterización térmica, respectivamente) y el problema de cuantificación de incertezas de f) (en la propagación de errores de radio de las nanopartículas en la caracterización térmica).

2.1 Análisis preliminar

El primer estudio se centra en verificar la consistencia del modelo acoplado bidimensional (incluyendo su formulación, condiciones iniciales y de contorno, y valores de parámetros de referencia) mediante la reproducción de varios casos simulados propuestos originalmente en [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#). Se destaca entre las simulaciones reproducidas, la correspondiente a la obtención del perfil de temperaturas en puntos del centro de la barra a lo largo de su espesor, tal que se cumpla la condición de que el contorno de entrada llegue a la temperatura de 173°C. Para ello, se resolvió el problema directo acoplado de las Ecs. (2) y (3) en un modelo 2D. Por otro lado, se calculó la fuente térmica equivalente siguiendo el

procedimiento en [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#) y se empleó para resolver el problema térmico en 2D, obteniendo un segundo perfil de temperaturas para comparar. Mediante este análisis, podemos estudiar el error conjunto del modelo en términos de tiempo y temperaturas.

2.2 Estimación de la fuente térmica equivalente parametrizada

Las dificultades inherentes a la estimación de una fuente térmica sin una prescripción dada de forma, tales como el problema de la dimensionalidad, la mayor sensibilidad al ruido y la necesidad de métodos de resolución de alta complejidad computacional, nos ha llevado a un enfoque parametrizado de la fuente que en buena medida se ve apoyado por la estructura simplificada que propone el modelo de la barra infinita. A esto sumamos la aproximación adicional de considerar al material con una configuración solamente absorbente. De este modo, la fuente de calor es estimada mediante la minimización de los funcionales de la Ec. (5) o bien de la Ec. (6)

$$\min_{A,B} J_1 = \|T_{acoplado}(\vec{r}_0, t) - T_{2D,térmico}(\vec{r}_0, t)\|^2 \quad (5)$$

$$\min_{A,B} J_2 = \|T_{acoplado}(z, t_0) - T_{2D,térmico}(z, t_0)\|^2 \quad (6)$$

donde $T_{acoplado}(\vec{r}_0, t)$ y $T_{2D,térmico}(\vec{r}_0, t)$ se refieren al perfil temporal de temperaturas en el punto central de sensado \vec{r}_0 generados respectivamente usando el modelo 2D acoplado y usando el modelo bidimensional térmico donde A y B corresponden a los parámetros que definen a $Q_r = A \exp(Bz)$ donde z representa la dimension característica de la barra; en tanto que $T_{acoplado}(z, t_0)$ y $T_{2D,térmico}(z, t_0)$ se refieren al perfil de temperaturas, en la zona central del sensor a lo largo de z .

2.3 Caracterización térmica

Los ensayos numéricos de caracterización térmica corresponden a la estimación de valores medios para el calor específico C_p y la conductividad térmica k siguiendo nuevamente como en las minimizaciones anteriores un esquema de mínimos cuadrados, esta vez bajo restricciones como en la Ec. (7)

$$\min_{C_p, k} J_3 = \|T_{acoplado}(\vec{r}_0, t) - T_{2D,térmico}(\vec{r}_0, t)\|^2 \text{ sujeto a } C_p^{\min} \leq C_p \leq C_p^{\max}, k^{\min} \leq k \leq k^{\max} \quad (7)$$

donde $T_{acoplado}(\vec{r}_0, t)$ y $T_{2D,térmico}(\vec{r}_0, t)$ son obtenidos para distintas fuentes de calor con $C_p^{\min}, C_p^{\max}, k^{\min}$ y k^{\max} como los valores extremos posibles de los parámetros térmicos con sentido físico.

2.4 Propagación de errores de radio de las nanopartículas en la caracterización térmica

Inicialmente siguiendo el trabajo de [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#) se han considerado NP de tipo nanoshell para la reproducción de uno de los ejemplos simulados en dicho trabajo en el análisis preliminar que puede verse en la sección 3.1. Sin embargo, al considerar el uso de los parámetros de diseño, tales como el radio de las NP (supuestas monodispersas para simplificar el estudio), se emplearon partículas esféricas de oro, despreciando entonces la coraza de material polimérico. Esto se realizó con el fin de obtener un modelo sencillo para el

cálculo de las eficiencias, haciendo uso del modelo de Mie (Bohren y Huffman, 1998) de acuerdo a la Ec. (8). Estas eficiencias luego son empleadas para obtener los coeficientes κ_a , σ_s y $\beta = \kappa_a + \sigma_s$ (y el albedo ω a partir de éstos últimos) a través de la Ec. (9).

$$Q_{\kappa_a} = \frac{8\pi a n_m}{\lambda} \operatorname{Im} \left[\frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right],$$

$$Q_{\sigma_s} = \frac{8}{3} \left(\frac{2\pi a n_m}{\lambda} \right)^4 \left| \frac{m^2 - 1}{m^2 + 2} \right|^2$$
(8)

$$\kappa_a = \pi a^2 Q_{\kappa_a} N t,$$

$$\sigma_s = \pi a^2 Q_{\sigma_s} N t$$
(9)

donde a es el radio de las NP (núcleo+coraza en el caso de las nanoshells), n_m es el índice de refracción del medio, n_p es el índice de refracción de las partículas de oro (variable con la longitud de onda λ y obtenido de Johnson y Christy (1972)); $m = n_p / n_m$ es el índice de refracción relativo y Nt es el número de partículas por unidad de volumen.

Finalmente, el estudio de propagación de errores se ha realizado considerando simplemente un proceso de simulación de Monte Carlo para muestras generadas considerando sucesivos análisis con un error relativo entre 5 y 10% en el radio de las NP de 49nm y el error asociado al valor de n_p de acuerdo a Johnson y Christy (1972). Para cada muestra generada se resuelve el problema inverso planteado en la Ec. (7) y luego se calculan las estadísticas resultantes para los valores estimados de C_p y k .

2.5 Implementación

La metodología empleada de elementos finitos se ha implementado en el software COMSOL6.1®. Las minimizaciones de las Ecs. (5), (6) y (7) se han resuelto mediante las funciones *fminunc* y *fmincon* del software MatlabR2021a, al mismo tiempo que se ha hecho uso de la interfaz entre ambos, Livelink®.

3 RESULTADOS

3.1 Análisis Preliminar

En la Figura 1 se muestran los resultados del análisis preliminar descripto en la sección 2.1., donde adicionalmente se resolvió el problema inverso térmico de la Ec. (6) planteado en la sección 2.2. En ella se estimó a partir de los datos del perfil de temperatura del problema acoplado, la fuente térmica parametrizada equivalente.

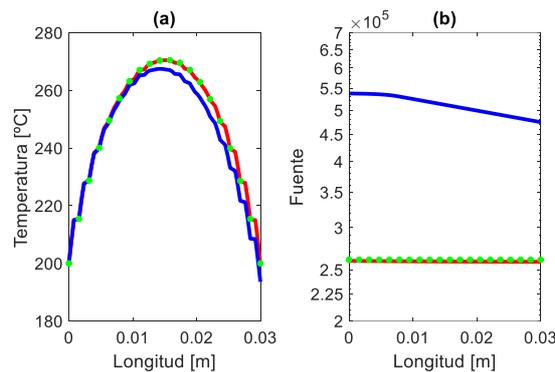


Figura 1: (a) Ajuste de los perfiles de temperatura obtenidos al resolver el problema acoplado (rojo), el problema térmico usando la fuente equivalente de Tjahjono y Bayazitoglu (2008) (azul) y el problema térmico usando la fuente equivalente obtenida del problema acoplado (puntos en verde); (b) Fuentes térmicas generada por el modelo 1D de una barra infinita unidimensional (azul), obtenida de la resolución del problema acoplado (rojo) y estimada de la resolución del problema inverso térmico (puntos en verde)

3.2 Alcance del modelo de barra unidimensional infinita

Comenzamos por analizar el error encontrado en el problema directo del ajuste de la serie temporal de temperaturas en el punto de sensado en el centro de la barra, como puede verse en la Figura 2. En este caso, se halló una discrepancia creciente en el tiempo con un error máximo relativo cercano al 15%. En tanto que al propagar la variación del radio de las NP, se obtuvo una alta sensibilidad de las temperaturas respecto de dicho parámetro. En la Figura 3, puede verse como considerando los errores planteados en el radio e índice de refracción del oro, los perfiles de temperatura obtenidos varían a valores del orden de doble de magnitud. En la Tabla 1, sólo se han seleccionado resultados para dos ejemplos puntuales prototípicos ya que en muchos de los casos analizados, las estimaciones resultantes prácticamente carecen de sentido físico en relación con el tipo de material analizado pese a haber empleado un esquema de optimización bajo restricciones como en la Ec. (7). En el primero de los ejemplos (caso 1) se observa que las estimaciones obtenidas de los parámetros térmicos empleando la fuente equivalente del modelo reducido podrían considerarse relativamente aceptables. Sin embargo, esto no ocurre en el segundo de los ejemplos (caso 2), con valores de C_p y k fuera de los rangos típicos para el material simulado, que en este trabajo corresponde a polidimetilsiloxano (PDMS). Se pudo ver en varios ejemplos simulados que incluso empleando una selección más refinada de valores de C_p^{\min} , C_p^{\max} , k^{\min} y k^{\max} , las estimaciones no convergen a un valor cercano al verdadero.

3.3 Uso de fuente térmica equivalente calculada a partir del problema acoplado

El hallazgo más prometedor ha sido el correspondiente al cálculo de una fuente equivalente de calor estimada en forma paramétrica, que ha mostrado un gran ajuste a la obtenida por COMSOL6.1® (Figura 2). Puede verse en la Tabla 1 que para el caso ideal, se logra recuperar los valores de C_p y k prácticamente de forma exacta. Sin embargo, para valores de radio con errores relativos alrededor del 5% sobre el valor nominal, el uso de la fuente obtenida con el valor nominal conduce a estimaciones inaceptables de C_p y k . Aparecen incluso algunos ejemplos como el caso 1 de la Tabla 1 donde los valores hallados son mucho peores a los obtenidos mediante la fuente del modelo de barra unidimensional infinita.

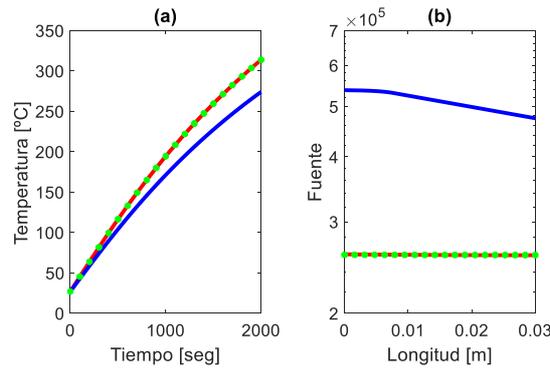


Figura 2: (a) Ajuste del perfil de temperaturas a los valores de referencia (puntos en verde) usando mediciones generadas con la fuente térmica equivalente (azul) y la fuente estimada parametrizada (rojo); (b) Fuentes térmicas correspondientes térmicas generada por el modelo 1D de una barra infinita unidimensional (azul), obtenida de la resolución del problema acoplado (rojo) y estimada de la resolución del problema inverso térmico (puntos en verde)

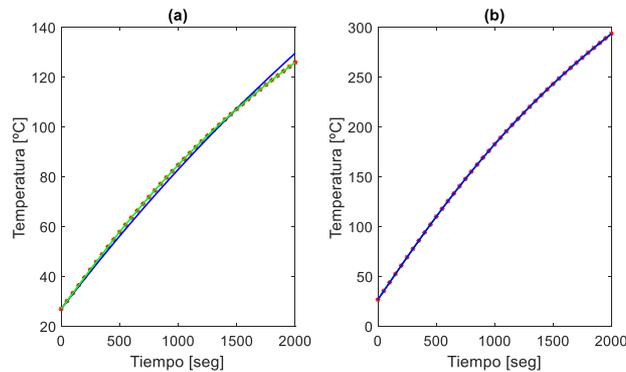


Figura 3: Ajuste del perfil temporal de temperaturas a los valores de referencia (puntos en rojo) usando mediciones generadas con la fuente térmica equivalente (azul) y con la fuente parametrizada (verde) para (a) el caso de índice de refracción del oro de $0.1397+5.0489i$ y radio de las NP de 44 nm y (b) índice de refracción de $0.1797+5.0989i$ y radio de las NP de 54 nm

| | Caso 1 | | Caso 2 | |
|---|--------|--------|--------|--------|
| | K | Cp | k | Cp |
| Fuente Modelo Reducido ¹ | 0.1405 | 1356.8 | 2 | 2994 |
| Fuente estimada con valor nominal de radio ² | 0.0655 | 928.34 | 0.577 | 1935.2 |
| Fuente estimada con valor real de radio ³ | 0.1699 | 1460.2 | 0.17 | 1460.1 |
| Valores de referencia | 0.17 | 1460 | 0.17 | 1460 |

Tabla 1: Estimaciones de conductividad térmica y capacidad calorífica para el caso de la Figura 3 (b) (caso 1) y para un índice de refracción del oro de $0.1397+5.0489i$ y radio de las NP de 46.55 nm (caso 2) considerando ¹ la fuente del modelo reducido de Tjahjono y Bayazitoglu (2008) y las calculadas a partir de las estimaciones del problema inverso térmico con mediciones del modelo acoplado usando ² el valor de radio nominal y ³ el valor de radio real para los valores de referencia empleados.

4 DISCUSIÓN

La naturaleza del modelo acoplado es responsable de capturar más detalles del fenómeno físico que el modelo reducido. Esto se traduce en una mayor riqueza de los datos simulados que el modelo reducido no puede manejar adecuadamente y resulta en una marcada discrepancia en la forma de la fuente de calor estimada a partir de la inversión de datos obtenidos con el modelo acoplado, respecto de la fuente calculada siguiendo a [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#). Esta discrepancia puede considerarse producto de las numerosas simplificaciones del modelo 1D aproximado sobre las que se fundamenta el cálculo de la fuente teórica y se cuantifica en estimaciones poco confiables de los parámetros térmicos.

Por otro lado, las mediciones experimentales suelen contener ruido y otras fuentes de variabilidad que pueden promediar o atenuar algunos de los efectos complejos que un modelo más detallado puede capturar. Curiosamente, esto puede hacer que un modelo reducido funcione mejor de lo esperado cuando se trabaja con datos reales, donde estas variabilidades actúan como una especie de regularización. Esta es una posible justificación del uso relativamente exitoso del modelo reducido en [Otero et al \(2019\)](#) en la estimación de valores medios de los parámetros térmicos sobre datos reales empleando algunas calibraciones hechas para adaptarlo a las diferencias en las condiciones experimentales. No obstante, la aplicación efectiva del modelo reducido en uno o dos casos experimentales no puede generalizarse y de hecho, en dicho trabajo se planteó la necesidad de realizar mejoras en el procedimiento descrito. Podemos mencionar dos en particular: i) el empleo de una calibración de mayor exactitud, que fue desarrollada posteriormente en [Otero et al \(2022\)](#) mediante un esquema híbrido de métodos finitos y aprendizaje profundo; y, ii) un estudio elaborado de la propagación del error de modelado en la fuente de calor, que se ha abordado parcialmente en este trabajo, a través del uso de un modelo acoplado bidimensional como referencia.

Aparece ahora tras las significativas limitaciones encontradas en el uso del modelo reducido con relación al modelo acoplado, la necesidad de una tercera mejora: la construcción de un nuevo modelo, en principio de tipo local, para la generación de la fuente de calor equivalente de acuerdo a los resultados simulados con el modelo bidimensional acoplado.

5 CONCLUSIONES

Se ha desarrollado una serie de ensayos computacionales para evaluar el uso de una fuente de calor equivalente en un problema de multifísica, donde dicha fuente es calculada a partir de un modelo teórico reducido para el caso de una barra infinita unidimensional. Los resultados revelan una discrepancia significativa entre la fuente calculada con el modelo teórico simplificado y la estimación obtenida al resolver el problema inverso térmico con mediciones generadas por el modelo bidimensional acoplado. La discrepancia en la fuente estimada con el modelo reducido luego se ha cuantificado a través de su uso para recuperar valores medios de los parámetros térmicos, que resultan en estimaciones de baja calidad en el mejor de los casos. Como aspecto favorable, y haciendo uso del cálculo de la fuente de calor equivalente para el problema acoplado que permite COMSOL6.1® se ha podido observar una buena aproximación entre esta fuente calculada y la parametrizada obtenida al resolver el problema térmico inverso. Sin embargo, también se observó una alta sensibilidad de las mediciones respecto a variaciones en los valores de radio de las NP. Esto se traduce en que el uso de una fuente calculada a partir de un valor de radio ligeramente diferente al real conduce a estimaciones inestables de los parámetros térmicos.

6 TRABAJO FUTURO

Como se mencionó en la sección 4, los resultados obtenidos en este trabajo plantean la

necesidad de construir un modelo de mayor fidelidad respecto al bidimensional acoplado.

En el trabajo de [Otero et al \(2022\)](#) a pesar de los buenos resultados obtenidos también aparecieron algunas importantes desventajas en el uso de herramientas de machine learning (ML) con la metodología híbrida allí desarrollada, tales como i) la necesidad de una gran cantidad de datos para construir, entrenar y validar efectivamente las redes neuronales profundas así como ii) el costo computacional asociado. Pero más aún, la principal desventaja de dicha metodología es la falta de interpretabilidad del modelo obtenido que es visto como una caja negra. Entendemos entonces que el objetivo principal en el desarrollo de este nuevo modelo, es por consiguiente superar estas dificultades, aunque continuando en el sendero de ML. Consideramos entonces que lo más apropiado es ir en dirección de la llamada Inteligencia Artificial Explicable (XAI) y en particular, siguiendo el enfoque de Aprendizaje por Transferencia (TL), ya que éste propone la transferencia de conocimiento de modelos ya existentes reduciendo por un lado la cantidad de datos necesarios, y por otro, el poder de cálculo no siempre al alcance de los investigadores ([Wang y Chen, 2023](#)). Específicamente, la idea es diseñar un modelo sustituto local basado en reglas difusas ya que el mismo tiene una alta interpretabilidad, al estar compuesto por una colección de reglas legibles, por lo que es adecuado para la interpretación de predicciones ([Zhu et al, 2023](#)). El uso de TL en este contexto implica aprovechar el conocimiento adquirido por el modelo reducido de [Tjahjono y Bayazitoglu \(2008\)](#) para guiar la construcción de un modelo de reglas difusas interpretable y efectivo. En este sentido, aunque las mediciones generadas por el modelo acoplado no sean idénticas a las mediciones reales, las mismas pueden capturar patrones y comportamientos subyacentes relevantes. De este modo, el nuevo modelo puede aprender estos patrones y generalizarlos de manera efectiva para estimaciones en situaciones más realistas.

REFERENCIAS

- Bohren, C. F., and Huffman, D. R., *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*, Wiley, 1998.
- Johnson, P.B. and Christy, R.W., Optical Constants of the Noble Metals, *Physical Review B*, 6: 4370-4379, 1972.
- Modest, M. F., *Radiative Heat Transfer*, Academic Press, 2013.
- Otero, F., Frontini, G., Chiuro, C., y Eliçabe, G., Solución de un Problema de Transferencia Radiativa aplicado al Calentamiento Remoto, *Matemática Aplicada Computacional e Industrial* 5:226-229, 2015.
- Otero, F., Eliçabe, G., Altuna, F., Hoppe, C., Chiuro, C., y Frontini, G., Problema Inverso de Calentamiento Remoto empleando un Modelo Reducido para Caracterización de Polímeros”, *Matemática Aplicada Computacional e Industrial*, 7: 401-404, 2019.
- Otero, F., Altuna, F., and Chiuro, C., A FEM/AI Strategy for Thermal Characterization of an Epoxy Nanocomposite via a Laser-based Nondestructive Testing Experiment, in *Proc. 2022 IEEE Biennial Congress of Argentina*, San Juan, Argentina, 1-7, 2022.
- Tjahjono, I. N. and Bayazitoglu, Y., Near-infrared light heating of a slab by embedded nanoparticles. *International Journal of Heat Mass Transfer*, 51:1505-1515, 2008.
- Wang, J., and Chen, Y., *Introduction to Transfer Learning. Algorithms and Practice*, Springer, 2023.
- Zhu, X., Wang, D., Pedrycz, W., and Li, Z., Fuzzy Rule-Based Local Surrogate Models for Black-Box Model Explanation. *Transactions on Fuzzy Systems*, 31: 2056-2064, 2023.