

Estructura Híbrida de Vecindad para la Optimización de Propiedades Mecánicas de un Acero Microaleado en Base a su Composición Química

Marco Antonio Cruz-Chávez¹, Sergio Alonso Serna Barquera¹, Jazmín Yanel Juárez Chávez¹, Bernardo Campillo Illanes²

Centro de Investigaciones en Ingeniería y Ciencias Aplicadas – UAEM¹, Instituto de Ciencias Físicas²

Av. Universidad 1001. Col. Chamilpa, C.P 62209.
Cuernavaca, Morelos, México.

{mcruz, aserna, jazmin}@uaem.mx, bci@fis.unam.mx

Resumen. La mayoría de los problemas son difíciles de resolver por diferentes razones. Para casos como este tema de investigación, se tomaron en cuenta las posibles soluciones que pueden existir en un *espacio de soluciones*, la *complejidad* del problema a resolver, la *función objetivo* respectiva, la *posible solución* surgida del espacio de soluciones propuesto e incluso el equipo con el que se cuenta. En los problemas actuales, se ha optado por emplear técnicas heurísticas de búsqueda por vecindad, las cuáles han demostrado ser métodos muy eficientes en la búsqueda de soluciones aproximadas para dichos problemas. Realizar pruebas para medir u obtener sus características, probar su durabilidad o resistencia, suele ser demasiado costoso, tal es el caso de los aceros microaleados donde es mucho más económico simular las pruebas apoyándose en la termodinámica computacional, la cual se ha convertido en una herramienta poderosa para el diseño y desarrollo de las aleaciones haciendo uso de criterios de optimización basados en los principios termodinámicos, cinéticos y mecánicos.

Palabras Clave: Metaheurística, estructuras de vecindad, algoritmo de recocido simulado, algoritmo de búsqueda local iterada, acero microaleado.

1 Introducción

El uso del acero va mejorando con el paso del tiempo, especialmente aquel que ofrece la mejor resistencia a la corrosión gracias a los elementos que contiene y que le dan esa característica. La microestructura de los aceros es muy compleja y ésta es el resultado de varios tratamientos térmicos por los que el material ha pasado hasta obtener la microestructura final deseada. Un descubrimiento que permitió entender mucho mejor a la metalurgia física de las microaleaciones del acero fue el realizado

por Petch [8]. Este descubrimiento indicó la relación cuantitativa entre el tamaño de grano, la resistencia y las propiedades de fractura del acero. Con las primeras investigaciones de Petch, fue posible revelar que era principalmente la formación de finos carburos /nitruros los que proporcionaban el refinamiento del grano y el fortalecimiento de la precipitación. Gracias a este descubrimiento, la resistencia en el acero se convirtió en tema de estudio.

Algunos estudios realizados, para obtener una resistencia cercana a la óptima, se han apoyado en los métodos de optimización. Tal es el caso de los estudios de investigación realizados por el Dr. Rivera Díaz del Castillo [9, 13, 14] donde hace uso del Algoritmo Genético. Esta investigación está basada en una composición química donde el acero contiene 13 aleaciones consideradas: C, Cr, Ni, Ti, Mo, Al, Cu, Co, Nb, N, V, Mn y Si. La concentración asignada a cada uno de estos elementos está dentro de su rango y se basó en las restricciones industriales y tecnológicas relacionadas con el precio y la habilidad para fabricarlas (Tabla 1). Actualmente, la termodinámica computacional se ha convertido en una herramienta poderosa para el diseño y desarrollo de las aleaciones, las cuales, se realizaron en una computadora haciendo uso de criterios de optimización basados en los principios termodinámicos, cinéticos y mecánicos.

Factores como la composición química, el tamaño de grano, la cantidad de precipitados, el algoritmo genético y la optimización dieron pie para generar un nuevo proyecto y comparar la eficacia, eficiencia e importancia de hacer uso de un algoritmo computacional diferente a los usados actualmente. El Algoritmo de Recocido Simulado (en inglés Simulated Annealing) es una técnica de búsqueda local estocástica, y es el actor principal para el desarrollo de este nuevo proyecto, tomando en cuenta únicamente la composición química (variable única dentro del Algoritmo de Recocido Simulado) del acero microaleado pero, el uso del Algoritmo de Recocido Simulado se obtuvo mediante la Búsqueda Local (en inglés - Local Search), la primera solución evaluada con la Búsqueda Local Iterada (en inglés - Iterated Local Search Algorithm) hizo uso de una Estructura de Vecindad y fue ésta la que dio la pauta para implementar una Estructura de Vecindad adecuada en el Algoritmo de Recocido Simulado.

Tabla 1. Rango de concentraciones de todos los componentes empleados en la optimización (% en peso) [Xu et al., 2009].

	C	Cr	Ni	Ti	Mo	Al	Cu	Co	Nb	N	V	Mn	Si	Fe
Min	0.05	12.00	1.00	0.01	0.50	0.01	0.50	0.01	0.01	0.01	0.01	0.50	0.30	Bat.
Máx	0.20	20.00	15.00	1.50	10.00	1.00	10.00	2.00	0.10	0.01	0.20	0.50	1.00	

Debido a la dureza que presentan algunos problemas se ha optado por emplear técnicas heurísticas de búsqueda por vecindad, las cuáles han demostrado ser métodos muy eficientes en la búsqueda de soluciones aproximadas para dichos problemas. El

tamaño y la estructura son la parte medular de una vecindad [7]. Si el tamaño de una vecindad es mayor, mejor será la calidad de las soluciones localmente óptimas al igual que la precisión de la solución final. Sin embargo, el tiempo que se requiere para realizar una iteración dentro de la vecindad se verá incrementado con respecto al tamaño de la vecindad, por lo que, se debe emplear un tamaño adecuado que permita generar un mejor desempeño de la función de vecindad a emplear [2].

La Estructura de Vecindad propuesta en este artículo es la Híbrida, debido a que en la mayoría de las metaheurísticas se utiliza, como es el caso del Algoritmo de Recocido Simulado, Búsqueda Local Iterada, Búsqueda Tabú, Algoritmos Meméticos (versión híbrida del algoritmo genético), Colonia de Hormigas, etc. El uso de este tipo de estructura de vecindad Híbrida, es debido a la eficiencia, eficacia y mejora que ha demostrado tener en las metaheurísticas mencionadas.

Cruz, CH. M.A. et al [2], en su artículo Estructura Híbrida de Vecindad para Problemas de Optimización Discreta, presentó un análisis comparativo de un grupo de estructuras de vecindad, incluida la estructura híbrida. También, prueban la eficiencia y eficacia de cada una de estas estructuras utilizando el Classical Symmetric Traveling Salesman Problem. Con la realización de este estudio, identificaron la estructura de vecindad que les permitió llevar a cabo una mejor exploración y explotación del espacio de soluciones para problemas de optimización discreta. Probaron de forma experimental, que la estructura de vecindad híbrida es mejor en eficacia que las otras técnicas con la cual fue comparada, además de que en la eficiencia demostró su competitividad.

La importancia de esta investigación radicó en aplicar la Estructura de Vecindad Híbrida, ya que se puede hacer uso de ella en los diferentes tipos de metaheurísticas, basándose en la comparación de otras estructuras de vecindad para comprobar qué tan buena es en relación con lo mencionado en la literatura. La aportación obtenida es una Estructura de Vecindad Híbrida que comprobó y demostró, a través de resultados experimentales, que es mejor que las otras estructuras propuestas.

La estructura de este artículo se compone de seis secciones: La primera sección hace referencia a la introducción. La segunda sección, muestra la definición del problema. En la tercera sección, se desarrolla el tema de la Estructura de Vecindad. La cuarta sección contiene el desarrollo de la Búsqueda Local Iterada, la cuál hizo uso de las estructuras de vecindad mencionadas en la sección tres. La quinta sección contiene los Resultados Experimentales aplicando la Búsqueda Local Iterada con cada una de las estructuras de vecindad. También contiene la discusión de los resultados. Por último, en la sexta sección se detallan los trabajos futuros en los cuales se aplicará la Estructura de Vecindad propuesta en este artículo y en alguna otra metaheurística, cómo genéticos.

2 Problema

Las formas o estructuras alotrópicas del hierro puro son la base en la que se fundamentan las relaciones de fase o entre fases en aceros con varios elementos de aleación. Conforme se añaden otros elementos al hierro estos pueden remplazar a sus

átomos en sus estructuras bcc (ferrita) o fcc (austenita). Los átomos más grandes o casi del mismo tamaño que el hierro son elementos de aleación sustitucional porque forman soluciones sólidas sustitucionales en las estructuras bcc o fcc del hierro. Algunos de estos elementos como el níquel y el manganeso estabilizan la forma fcc del hierro mientras que otros tales como el cromo y el molibdeno estabilizan la estructura bcc. Los elementos que son sustancialmente más pequeños que el hierro toman posiciones en los intersticios entre los átomos de hierro, y forman lo que se conoce como solución sólida intersticial.

El carbono y el nitrógeno son los elementos intersticiales más comunes y la habilidad que tienen las estructuras fcc y bcc del hierro en acomodar estos átomos es un factor importante para determinar la variedad de microestructuras en los aceros. La austenita, estable a altas temperaturas, tiene una solubilidad relativamente mayor por el carbono. Siendo que la ferrita tiene menos sitios intersticiales que la austenita y, por ende, tiene menor solubilidad sólida de elementos intersticiales [6]. Si se enfría desde la temperatura en donde la austenita es estable hasta la temperatura donde la ferrita también lo es, el carbono debe dejar la estructura bcc de la ferrita para formar carburos mediante algún mecanismo controlado por difusión. Si la difusión es reprimida al enfriar rápidamente, el carbono estará sobresaturado en la ferrita.

Cuando la solubilidad sólida de varios elementos en la ferrita o austenita se excede, se forman nuevas fases que permiten acomodar el exceso de estos elementos, por ejemplo en las aleaciones Fe-C se forma una fase de carburo conocida como cementita [1] (carburo de hierro) que tiene una estructura cristalina ortorrómbica. Cuando la solubilidad sólida de ciertos elementos de aleación sustitucionales se excede en los aceros, se forman carburos complejos con varios componentes con estructuras cristalinas que pueden acomodar el exceso de estos elementos sustitucionales [3]. Algunos de estos elementos como el Cr, Mo, Ti, V, o Nb, son fuertes formadores de carburos, y se añaden a los aceros porque sus carburos mejoran las propiedades mecánicas o ayudan a controlar la microestructura.

Los aceros microaleados de alta resistencia y baja aleación (High Strength Low Alloy-HSLA) ó aceros HSLA se han posicionado actualmente como una clase importante de materiales estructurales de alta resistencia debido a que ha tenido una mayor expansión en su desarrollo y producción. El desarrollo de estos aceros incluye, su diseño de aleación, procesamiento, y aplicaciones, su desarrollo e investigación cubre las últimas cuatro décadas, haciéndose indispensables para aplicaciones estructurales [12].

Su habilidad para obtener propiedades mecánicas finales requeridas en aplicaciones de ingeniería únicamente mediante la laminación controlada en caliente y enfriamiento acelerado, elimina la necesidad de aplicarles costosos tratamientos térmicos posteriores. Se pueden obtener esfuerzos de cedencia entre 550 y 660 MPa a través de una adición menor al 0.1% de ciertos elementos considerados microaleantes tales como el Nb, V, y Ti que son fuertes formadores de micro-partículas (precipitados) de carbonitruros a bajo costo. Estos elementos incrementan considerablemente la resistencia del acero y son una característica de la mayoría de los aceros HSLA. Debido a su producción económica, se han vuelto atractivos para reemplazar aceros tratados térmicamente en aplicaciones tales como: camiones, rieles de trenes, estructuras para grúas incluso para la industria aeronáutica y automotriz, etc. Actualmente, se han desarrollado mejoras en la fundición del acero y su

laminación reduciendo aun más su costo, por lo que han aumentado su competitividad.

La Tabla 2 muestra datos históricos del uso de elementos microaleantes en aceros en países industrializados y la resistencia alcanzada por estos. Estos datos fueron recabados de la literatura y demuestran un uso temprano de estos elementos microaleantes V, Ti y Nb (a pesar de que no se hayan publicado).

Tabla 2. Historia de las Microaleaciones.

<i>Elemento</i>	<i>Nivel / peso %</i>	<i>País</i>	<i>Fecha</i>	<i>Resistencia a la cedencia/MPa</i>
Vanadio	0.10 – 0.20	EU	1916	275 – 345
Vanadio	0.10	ALEMANIA	1945	> 390
Niobio	0.02 – 0.03	EU	Pre 1959 (patente 1940)	325 – 445
Niobio	0.005 – 0.05	INGLATERRA	1959	350 – 425
Titanio	0.10 – 0.20	ALEMANIA	1921	260 - 550

Un descubrimiento que permitió un mejor entendimiento de la metalurgia física de las microaleaciones del acero fue el hecho por Petch [8]. Dicho descubrimiento, indica la relación cuantitativa entre el tamaño de grano, la resistencia y las propiedades de fractura del acero. Gracias a las primeras investigaciones realizadas por Petch [8], fue posible revelar que era principalmente la formación de finos carburos /nitruros los que proporcionaban el refinamiento del grano y el fortalecimiento por precipitación. El V, Nb y T son los elementos asociados con la formación de precipitados de carburos y nitruros, y por lo tanto, la estabilidad y solubilidad de dichos precipitados a varias temperaturas dentro del rango de proceso del acero los hace de vital importancia. En la Tabla 3 se describen brevemente los roles principales del V, Nb y T.

Tabla 3. Efecto de los elementos microaleantes.

Microaleantes	Endurecimiento por precipitación después del Laminado en Caliente	Endurecimiento por precipitación después de Normalizar	Influencia la Recristalización durante el Laminado en Caliente	Refinamiento del tamaño de grano en la Normalización	Refinamiento del tamaño de grano durante la Austenitización a Alta Temperatura	Influencia las Características de Transformación después del Laminado en Caliente	Intersticiales
V	VN, VC	VC	-	VN	-	-	V
Nb	NbCN	-	Nb, NbCN	NbCN	-	Nb	Nb
Ti	TiC	-	-	TiC	TiN	-	Ti

Para la mayoría de los aceros HSLA un tamaño de grano fino de ferrita proporciona la mayor parte de los requisitos en fuerza y resistencia. Cada uno de los elementos microaleantes es capaz de provocar un grano refinado. Otro papel importante de los elementos microaleantes es el incremento de la resistencia mecánica por precipitación. El endurecimiento más efectivo es provocado por la formación de finos

carbonituros durante o inmediatamente después de la austenitización de la ferrita. En los aceros microaleados el aumento de la tensión de la precipitación puede ser sustancial, a pesar de la fracción de volumen relativamente bajo, debido a los tamaños de las partículas finas que son a menudo menos de 10 nm.

En la mayoría de los aceros el V es más soluble que el Nb, incluso cuando el contenido de N es mayor. Sin embargo, el V es el elemento más versátil en la precipitación, capaz de ser efectivo en aceros con composiciones muy distintas.

A menudo, la adición múltiple de elementos microaleantes tienen un mayor efecto sobre las propiedades del acero que la suma de los efectos individuales de cada elemento [8]. Ejemplo de un acero, Tabla 4, producido en molinos de laminación en caliente, que alcanzó un límite elástico de 700 MPa formado por las contribuciones de refinamiento de grano y una solución sólida, precipitación y la dislocación (transformación) en el fortalecimiento mediante una combinación de aleación y elementos microaleantes [8].

Tabla 4. Acero producido en molinos de laminación en caliente.

Dislocación de endurecimiento por aleación con Mo, Mn, N, Ti, B.	<i>Resistencia a la cedencia</i>
Endurecimiento por precipitación con aleación con Nb, Ti o, V + N	
Refinamiento de grano por TM, de aleación con Nb	
Endurecimiento por solución sólida de Mn, Si	
Base de la fuerza del acero suave	

Analizando algunas de las características que contienen los aceros HSLA para lograr un tamaño de grano y una cierta cantidad de precipitados con los microaleantes que la componen se decidió, para este trabajo de investigación, trabajar únicamente con la composición química de este tipo de aceros. Otra de las razones es que, para medir la resistencia de un acero, sólo se ha aplicado uno de los métodos computacionales existentes, el Algoritmo Genético. Sin embargo, contamos con el Algoritmo de Recocido Simulado, el cual ha demostrado estar entre los mejores debido a los resultados obtenidos en otras áreas de investigación, por ende, es el algoritmo que se aplicó y con el cual se obtuvo una solución cercana a la óptima en cuanto a la resistencia del acero.

La composición química con la que se trabajó, Tabla 5, está basada en el acero X52E. Es a partir de esta que se obtuvo, en forma aleatoria, los elementos del C hasta el V.

Tabla 5. Composición química de los elementos que conforman el acero X52E. (% en peso).

0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Fe	C	Cr	Cu	Mn	Mo	Ni	V	N	Nb	Ti	P	S	Si
98.9	0	0	0	0	0	0	0	0.001	0.001	0.001	0.013	0.002	0.3

0	0.02	0.02	0.2	0.8	0.008	0.02	0	0.001	0	0	0.013	0.002	0.1
98.9	0.08	0.1	0.6	1.2	0.03	0.1	0.15	0.008	0.06	0.02	0.013	0.002	0.3

Para obtener la función objetivo, fue necesario basarse en las siguientes microestructuras:

Microestructuras de Ferrita Acicular y Bainíticas

La bainita y la ferrita acicular tienen en común muchas similitudes morfológicas, la ferrita acicular a menudo se considera una forma de bainita superior de bajo carbono. Estas estructuras forman la base de ciertos aceros de baja aleación y alta resistencia: aceros estructurales bainíticos, los materiales aus-revenidos y aceros aleados. Estos aceros se utilizan en secciones grandes de recipientes a presión, tuberías y generación de potencia. Las estructuras bainíticas y aciculares también se encuentran o generan en soldaduras y zonas afectadas por el calor. Se han hecho muchas mediciones de sus propiedades, pero se ha tenido poco éxito en relacionar cuantitativamente su microestructura a sus propiedades, caso contrario a los aceros con estructuras ferrítico - perlíticas. Esto se debe, a que estas estructuras son complejas y difíciles de caracterizar cuantitativamente.

El Esfuerzo de Cedencia

Debido a la cedencia continua de estas estructuras, el esfuerzo de cedencia σ_y usualmente se refiere al 0.2% del esfuerzo de prueba. Los mecanismos principales para su resistencia son debido al tamaño de grano, dislocaciones, dispersión de carburos y solución sólida. Es bien sabido [10], que la resistencia a la tensión se incrementa linealmente al descender su temperatura de transformación, debido a que su relación esfuerzo de cedencia/esfuerzo de tensión es aproximadamente 0.7 [10], este esfuerzo de cedencia se incrementará al decrecer su temperatura de transición. Esto es debido a que todos los mecanismos de endurecimiento anteriores se incrementan al decrecer la temperatura de transición. La temperatura de transición, por ejemplo la temperatura B50, se relaciona linealmente con la composición del acero [11] en donde se puede utilizar una ecuación lineal, ec. 1, del siguiente tipo para describir aproximadamente el σ_y :

$$\begin{aligned} \sigma_y = & 170 + 1300(\text{wt.\%C}) + \\ & + 160(\text{wt.\%Mn}) + 160(\text{wt.\%Cr}) + \\ & + 130(\text{wt.\%Mo}) + 88(\text{wt.\%Ni}) + \\ & + 45(\text{wt.\%Cu}) + 270(\text{wt.\%V}) \end{aligned} \quad (1)$$

Es con esta ecuación con la que se obtiene el esfuerzo de cedencia y se usó como Función Objetivo de esta investigación para obtener las soluciones que sirvieron para compararse con estructuras computacionales como las que componen una Estructura

de Vecindad. Mediante esta ecuación, se determinó la Estructura de Vecindad más ideal para aplicarle el Algoritmo de Recocido Simulado e iniciar la sintonización.

3 Estructuras de Vecindad

Para decidir la forma en la cual se debe determinar el espacio de soluciones del problema con el cuál se esté tratando, se debe conocer y entender, primero, el problema [4]. Es así como se define el espacio de soluciones que tendrá un vecindario, sin olvidar el objetivo: Maximizar.

Si se parte de una composición química ya establecida, se puede obtener una mejor composición del acero. Los porcentajes de los elementos que integran el acero X52E serán la base para que obtengamos, en forma aleatoria, la primera solución. Para explicar lo que es una vecindad (Fig. 1), tomemos la primera solución como un punto, al cual representaremos con s , todas las soluciones que estén cerca de ese punto serán consideradas el vecindario representado por $N(s)$. Por ende, nuestro espacio de soluciones queda representado por S [7]. Gráficamente se vería así:

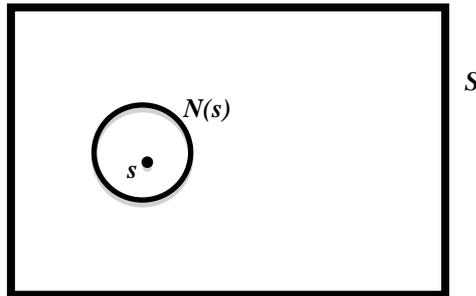


Fig. 1. Un espacio de soluciones S , una solución potencial s y su vecindario $N(s)$ indicado por el círculo interior alrededor de s .

Matemáticamente, tenemos que $s \in S$, el vecindario de s se define como un conjunto de posibles soluciones cerca de s , $N(s)$, representado por la función $N : S \rightarrow 2^S$. Si a partir de este punto generamos otro que mejore el primero, éste será representado por s' . De esta manera, nos iremos moviendo paso a paso desde una solución inicial hacia una solución que mejore la anterior y sea la que de una máxima resistencia de acuerdo a la Función Objetivo:

$$f(S') \geq f(S)$$

Para determinar el tamaño del vecindario, se tomó el incremento (Δ) y decremento (Δ^-) que se le puede hacer a 7 de los elementos de la composición del acero microaleado y la cual no perjudica dicha composición. El Fe, que es el elemento con el porcentaje mayor, contiene un rango sobre el cual puede realizarse la modificación.

El límite superior es de 98.9 con un límite inferior de 0. El límite superior será dividido entre 0.0001. Al realizar esta operación, obtenemos el tamaño de la vecindad: 989000.

3.1 Estructura de Vecindad Doble Aleatorio

Para la estructura de búsqueda de vecindad Doble Aleatorio se genera una solución s inicial factible a partir de la cuál se eligen dos números aleatorios $iposic1$ e $iposic2$, mismos que corresponden a una posición del vector donde está almacenada la solución inicial y los cuales se eligen de la siguiente forma:

El primer caso: incrementar el primer elemento (generado en $iposic1$) y decrementar el segundo elemento ($iposic2$) Fig. 2.

- El segundo caso: decrementar el primer elemento (generado en $iposic1$) e incrementar el segundo elemento ($iposic3$) Fig. 3.

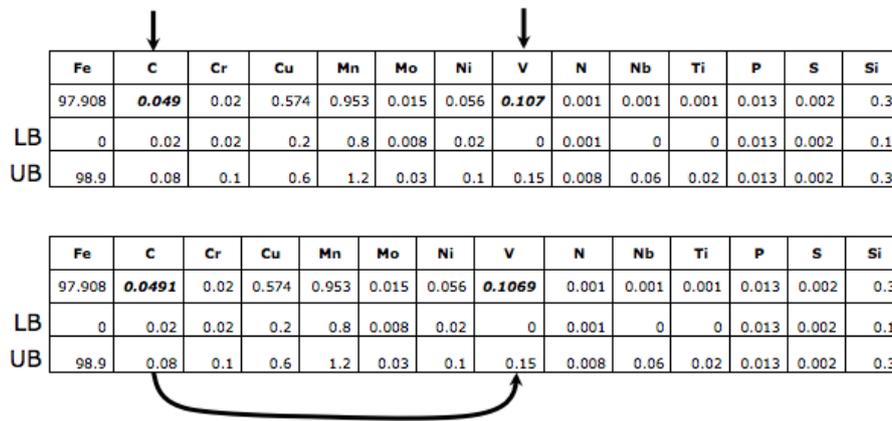


Fig. 2. Doble Aleatorio a una solución factible a partir de dos posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 1.

	Fe	C	Cr	Cu	Mn	Mo	Ni	V	N	Nb	Ti	P	S	Si
	97.908	0.049	0.02	0.574	0.953	0.015	0.056	0.107	0.001	0.001	0.001	0.013	0.002	0.3
LB	0	0.02	0.02	0.2	0.8	0.008	0.02	0	0.001	0	0	0.013	0.002	0.1
UB	98.9	0.08	0.1	0.6	1.2	0.03	0.1	0.15	0.008	0.06	0.02	0.013	0.002	0.3

	Fe	C	Cr	Cu	Mn	Mo	Ni	V	N	Nb	Ti	P	S	Si
	97.908	0.0489	0.02	0.574	0.953	0.015	0.056	0.1071	0.001	0.001	0.001	0.013	0.002	0.3
LB	0	0.02	0.02	0.2	0.8	0.008	0.02	0	0.001	0	0	0.013	0.002	0.1
UB	98.9	0.08	0.1	0.6	1.2	0.03	0.1	0.15	0.008	0.06	0.02	0.013	0.002	0.3

Fig. 3. Doble Aleatorio a una solución factible a partir de dos posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 2.

Los número aleatorios generados serán validados ya que no a todos los componentes se les puede hacer el cambio en el porcentaje de su composición química. Los elementos que se verán afectados por el incremento (Δ) y decremento ($-\Delta$) van del Fe hasta el V, es decir, se hará este cambio siempre y cuando, las posiciones generadas aleatoriamente no sean las mismas, si es este el caso, se generan nuevamente hasta que cumplan con la condición. Una vez cumplida dicha condición, se obtiene una nueva solución vecinal s' . El pseudocódigo del procedimiento encargado de ejecutar el Doble Aleatorio se muestra en la Fig. 4.

Fig. 1.

```

vDoble_Aleatorio( Composic_Acero2: estructura)
{ /*Sustituye a inicio – fin */
  int iposic1←0, iposic2←0, icomp1←0, icomp2←0, isigno←0, iSelecc←0;

1. while(1)
2.   iposic1← num_aleatorio de 0 hasta 7;
3.   iposic2← num_aleatorio de 0 hasta 7;
4.
5.   icomp1←iValidar_Celdas(iposic1);
6.   icomp2←iValidar_Celdas(iposic1);
7.
8.   if(iposic1 es diferente de iposic2)
9.     iSelecc ← num_aleatorio de 0 hasta 1;
10.    if (iSelecc es igual a 1)
11.      isigno←1;
12.      icomp1←iAumentarDisminuir_Valor(Composic_Acero2, iposic1, isigno);
13.      isigno←0;
14.      icomp2←iAumentarDisminuir_Valor(Composic_Acero2, iposic2, isigno);
15.    else
16.      isigno←0;
17.      icomp1←iAumentarDisminuir_Valor(Composic_Acero2, iposic1, isigno);
18.      isigno←1;
19.      icomp2←iAumentarDisminuir_Valor(Composic_Acero2, iposic2, isigno);
20.    fin if
21.    if ((icomp1 es igual a icomp2) Y (icomp1 Y icomp2 es diferente de 0))
22.      break;
23.    fin if
24.  fin if
25. fin while
}

```

Fig.4. Doble Aleatorio a una solución factible a partir de dos posiciones elegidas aleatoriamente.**Descripción:**

Todas las funciones aquí descritas, cuentan con las siguientes características generales: son funciones con el tipo de dato void y con un paso de parámetros por referencia. Cada función recibe como entrada una estructura con un tipo de dato definido por el programador [4]. Dicha estructura contiene la composición química del acero X52E ya definida; cada elemento del acero cuenta con un rango que indica el límite superior e inferior del elemento en el cual se podrá aumentar (Δ) o disminuir ($-\Delta$) la composición de dichos elementos.

Doble_Aleatorio: En esta función se generan dos números en forma aleatoria (líneas 2 y 3), los cuales se validan para asegurarse que son únicamente números del 0 al 7 (líneas 5 y 6) ya que estos indican las posiciones en la estructura del acero X52E de los elementos a los cuales se les hace el cambio (Fe, C, Cr, Cu, Mn, Mo, Ni, V). Una

vez validados, se comparan (línea 8), pues no se puede realizar el cambio si ambos números son iguales; si es este el caso, se generan nuevamente hasta que ninguno de ellos esté repetido, ahora, si el valor devuelto por la condición es 1, se genera un número en forma aleatoria, entre el 0 y el 1 (línea 9) para determinar cuál de las dos opciones se realizará (línea 10), es decir, cómo se hará el cambio a los elementos de la composición química del acero (líneas 11 a la 14 o 16 a la 19). Una vez realizado dicho cambio, se comparan los valores obtenidos (líneas 12 y 14 o 17 y 19), si ambos son iguales a 1 y diferentes de 0, el ciclo infinito *while(1)* se termina, devolviendo como resultado una estructura modificada lista para ser usada por el resto de las funciones que componen el programa.

3.2 Estructura de Vecindad del Triple Aleatorio

Para realizar una búsqueda por vecindad con un triple aleatorio, se lleva a cabo el mismo procedimiento explicado en la estructura anterior; la diferencia en esta estructura es que aquí se generan tres números aleatorios: *iposic1*, *iposic2* e *iposic3*. Para la estructura de vecindad Triple Aleatorio se generan dos casos para el cambio del porcentaje de sus elementos seleccionados.

- El primer caso: incrementar dos elementos (generados en *iposic1* e *iposic2*) y decrementar un elemento (*iposic3*). Fig. 5.
- El segundo caso: decrementar dos elementos (generados en *iposic1* e *iposic2*) e incrementar un elemento (*iposic3*).

El pseudocódigo del procedimiento con el Triple Aleatorio se muestra en la Fig. 6.

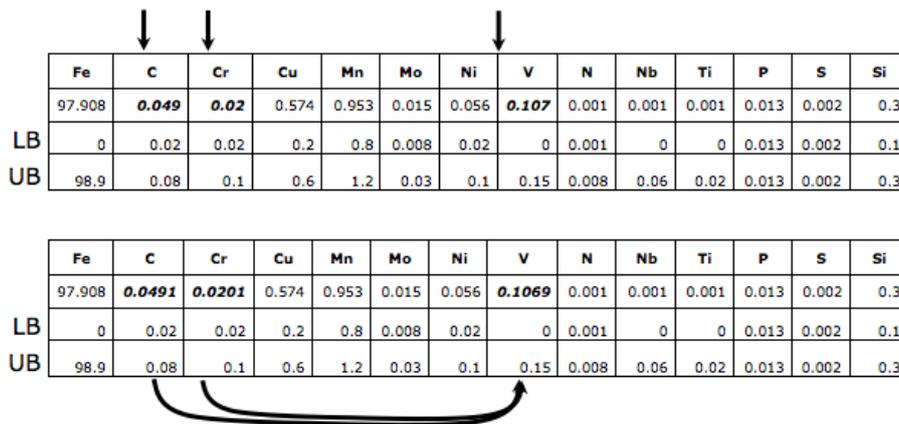


Fig. 5. Triple Aleatorio a una solución factible a partir de tres posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 1.

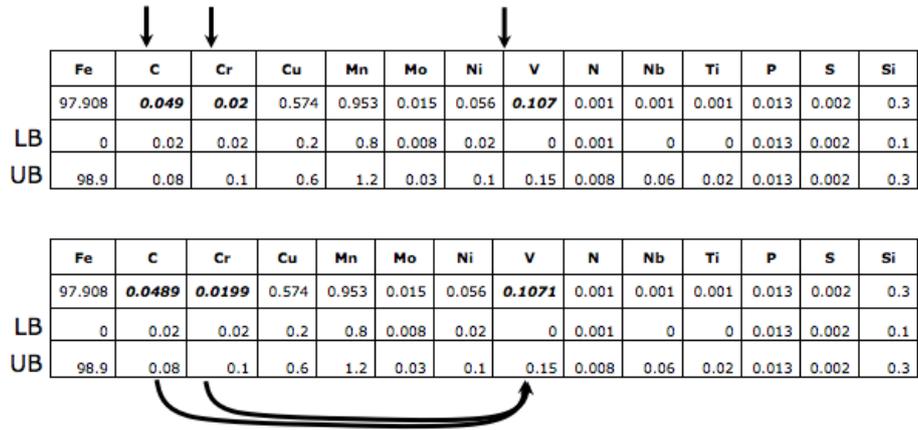


Fig. 6. Triple Aleatorio a una solución factible a partir de tres posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 2.

Triple Aleatorio. Esta función sigue las mismas condiciones que el Doble Aleatorio, la diferencia es que se generan tres números en forma aleatoria.

3.3 Estructura de Vecindad del Cuádruple Aleatorio

La diferencia con las otras estructuras, es que aquí se generan cuatro números aleatorios: *iposic1*, *iposic2*, *iposic3* e *iposic4*, los cuales indican las posiciones en la estructura, teniendo el mismo requisito del doble y triple aleatorio. Aquí, se generan dos casos para llevar a cabo el cambio del porcentaje de sus elementos seleccionados.

- Primero: incrementar dos elementos (generados en *iposic1* e *iposic2*) y disminuir dos elementos (*iposic3*, *iposic4*) Fig. 7.
- Segundo: decrementar dos elementos (generados en *iposic1* e *iposic2*) e incrementar dos elementos (*iposic3* e *iposic4*) Fig. 8.

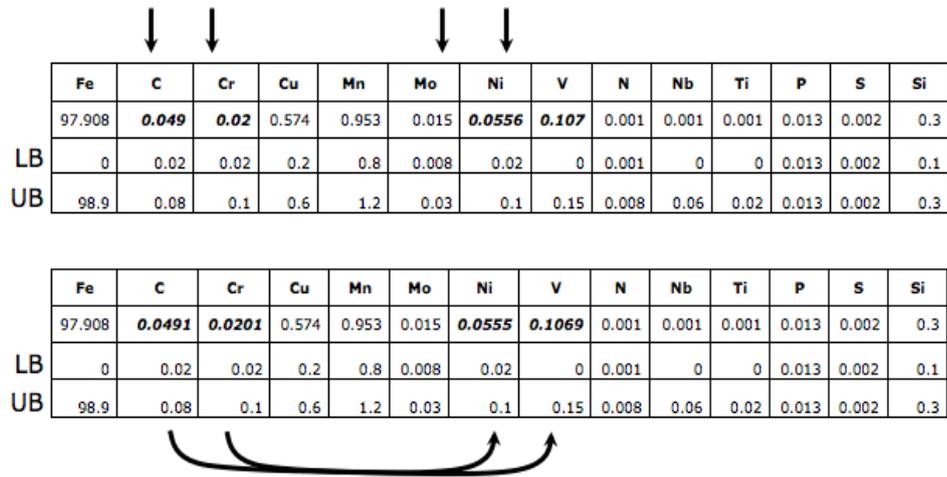


Fig. 7. Cuádruple Aleatorio a una solución factible a partir de cuatro posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 1.

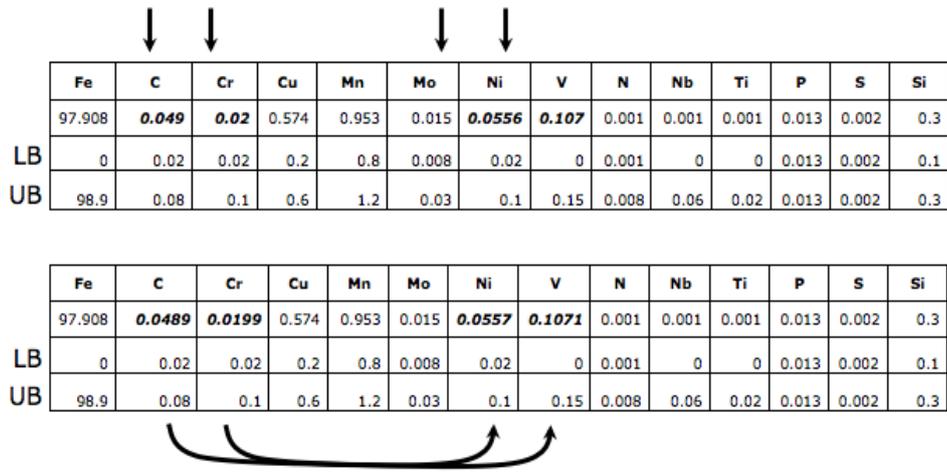


Fig. 8. Cuádruple Aleatorio a una solución factible a partir de cuatro posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 2.

3.4 Estructura de Vecindad del Quintuple Aleatorio

La diferencia con las otras estructuras radica en que aquí se generan cinco números aleatorios: iposic1, iposic2, iposic3, iposic4 e iposic5 y realiza el mismo comportamiento de las estructuras anteriores. Consta también de dos casos:

- Primer caso: incrementar tres elementos (generados en iposic1, iposic2 e iposic3) y disminuir dos elementos (iposic4 e iposic5) Fig. 9.
- Segundo caso: decrementar tres elementos (generados en iposic1, iposic2 e iposic3) e incrementar dos elementos (iposic4 e iposic5) Fig. 10.

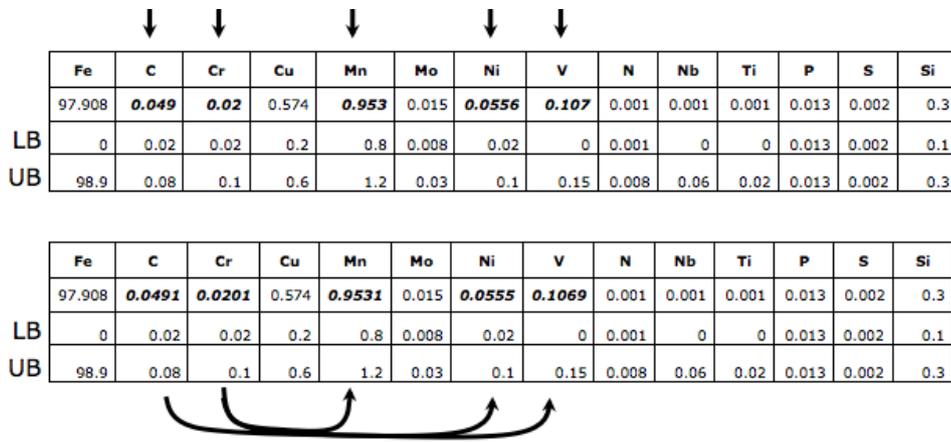


Fig. 9. Quintuple Aleatorio a una solución factible a partir de cinco posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 1.

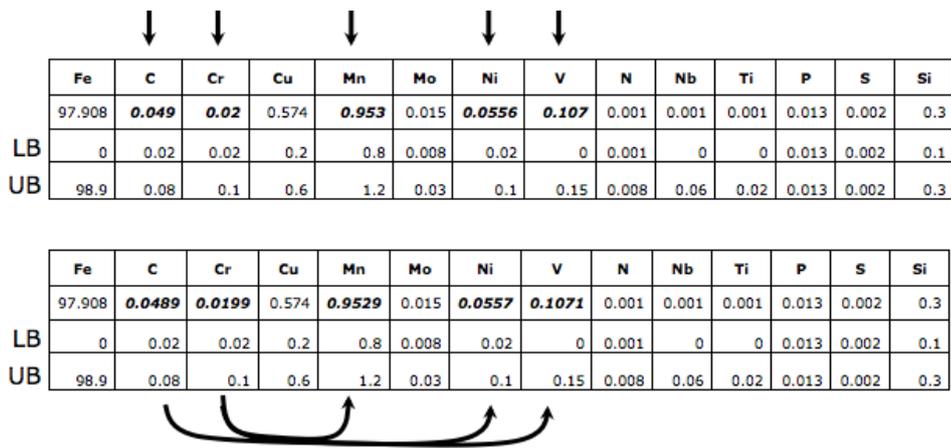


Fig. 10. Quintuple Aleatorio a una solución factible a partir de cinco posiciones elegidas aleatoriamente. Forma 2.

3.5 Estructura de Vecindad Híbrida Aleatorio

Esta estructura de vecindad se formó con las cuatro estructuras anteriores. La estructura de vecindad se selecciona en forma aleatoria para ejecutarse en cada iteración del ciclo de Búsqueda Local Iterada Fig. 11.

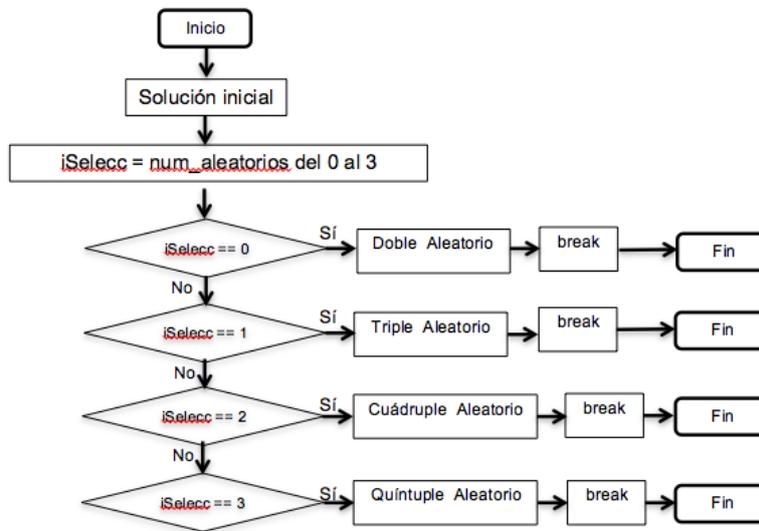


Fig. 11. Diagrama de Flujo de la Estructura Híbrida.

4 Búsqueda Local Iterada

Existen diferentes métodos que nos pueden acercar a una solución mucho mejor que con la que contamos actualmente. Los métodos llamados de optimización tienen un submétodo llamado Búsqueda Local Iterada el cual está basado en una heurística determinística.

Glover et al [5] menciona que es un método estocástico de Búsqueda Local que iterativamente aplica búsquedas locales a perturbaciones del punto actual (solución inicial) de una manera aleatoria en un espacio de soluciones óptimas. Este método trabaja en conjunto con la Búsqueda Local y es, mediante éste, que obtenemos la primera solución con la cual se iniciará el recorrido por el espacio de soluciones hasta ir mejorando.

Para comprender mejor el funcionamiento de la Búsqueda Local Iterada, es necesario entender, en primer lugar, como funciona la Búsqueda Local:

1. Obtenemos, del espacio de soluciones, una primera composición generada estocásticamente, la evaluamos mediante la función objetivo y generamos la *solución inicial* (S) [7].
2. A esta solución inicial le aplicamos un cambio (con alguna Estructura de Vecindad), la evaluamos con la Función Objetivo y obtenemos una *nueva solución* (S').
3. Si esta nueva solución S' es mejor que la actual S será sustituida, de lo contrario permanecerá igual; es decir:

$$si \ S' \geq S \ \text{entonces} \ S \leftarrow S'$$

4. Dentro de la búsqueda local se estarán repitiendo los pasos 2 y 3 hasta que se cumpla con el criterio de paro.

El cambio que se le aplique a S , mediante alguna Estructura de Vecindad, será el que determine el tipo de solución obtenida; si esta fue mejor, será reemplazada; de lo contrario permanecerá hasta encontrar una que la sustituya.

Para salir del espacio de soluciones óptimas locales, es necesario hacer uso del algoritmo de Búsqueda Local Iterada [5], el cual, una vez obtenido el valor óptimo local, es tomado como el mejor e iniciará la siguiente iteración. Con este nuevo valor, si en las siguientes iteraciones se encuentra uno mucho mejor que el actual, lo reemplaza, sino es así, se genera un nuevo cambio hasta encontrar uno mejor que el actual. En un algoritmo:

```

Hacer
  Generar solución inicial s
  Hacer
    s'=Estructura de Vecindad(s)
    Si (f(s') >= f(s)) entonces
      s = s'
      Si (f(s') > f(Sm-LS)) entonces
        Sm-LS=s'
      Fin-si
    Fin-si
  Hasta CP-LS
  Si (f(Sm-LS) > f(Sm-ILS)) entonces
    Sm-ILS = Sm-LS
  Fin-si
Mientras CP_ILS
    
```

Fig. 2. Búsqueda Local Iterada [Cruz-Chávez et al, 2010].

5 Resultados Experimentales

Para determinar la Estructura de Vecindad a la cual se le aplicará el Algoritmo de Recocido Simulado fue necesario realizar pruebas experimentales a cada una de ellas. Estas pruebas se llevaron a cabo en:

Tabla 6. Resultados de cada una de las EV evaluadas a 1 CP.

Promedio de 30 pruebas del algoritmo de Búsqueda Local Iterada

Doble A	560.7226	560.5687	560.71195	0.038837532
Triple A	560.723	559.261	560.7093767	0.041466125
Cuádruple A	560.7272	560.5694	560.7110967	0.031658928
Quíntuple A	560.7181	554.7926	560.69919	0.29037762
Híbrido A	560.7351	560.5701	560.7122467	0.039025684

Cluster Tarantula CIICAp-UAEM.

Características Cluster Tarantula:

Proc Max 3.20GHz

RAM 7GB

HD 1.12TB

:: FRONTEND

Proc Intel(R) Pentium(R) D CPU 2.80GHz

RAM 1GB

HD 160GB

:: **6 NODOS** Procs Intel(R) Celeron(R) CPU E1400 @ 2.00GHz

RAM 1GB

HD 160GB

Las pruebas que se realizaron en el clúster con las diferentes estructuras de vecindad (Doble, Triple, Cuádruple, Quíntuple e Híbrido Aleatorio) con un criterio de paro de 989000, sirvieron para determinar cual es la más eficiente y cual será usada para aplicar el Algoritmo de Recocido Simulado.

Los resultados arrojados por el clúster para la evaluación de las estructuras son:

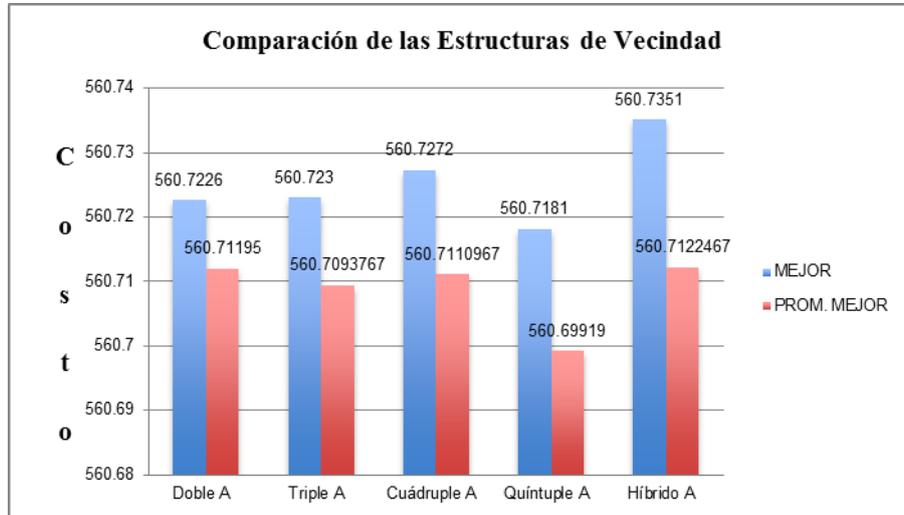
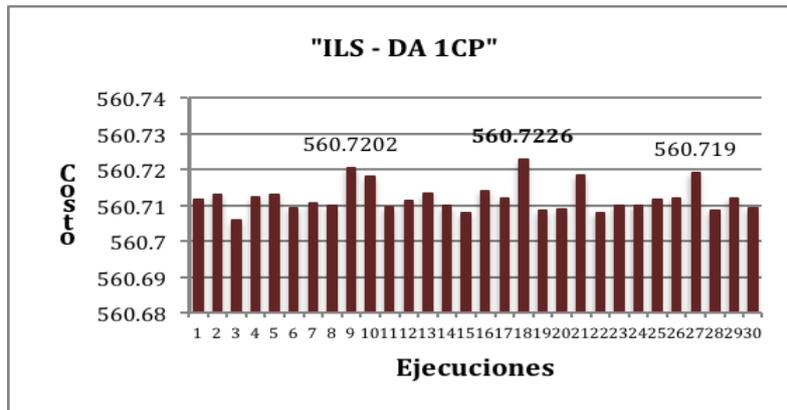
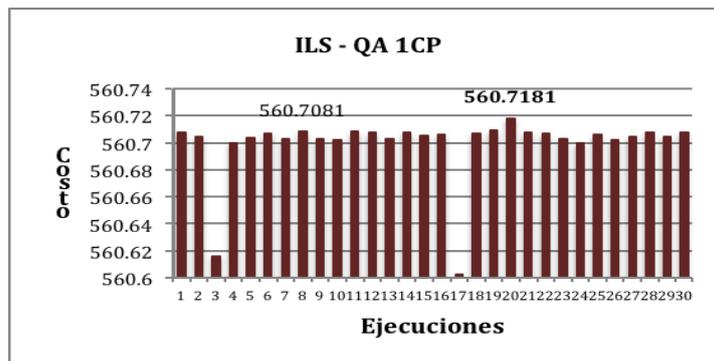
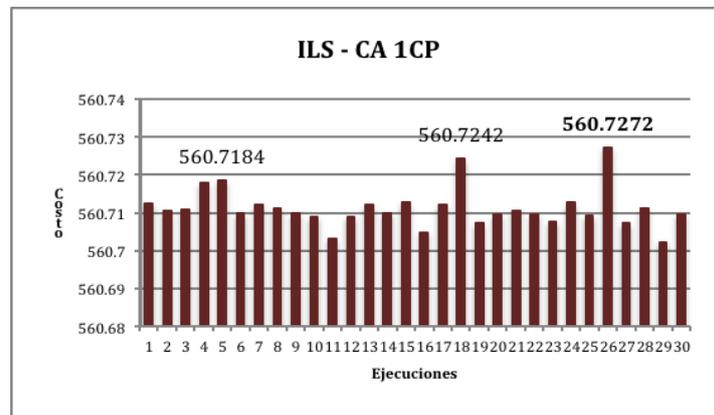
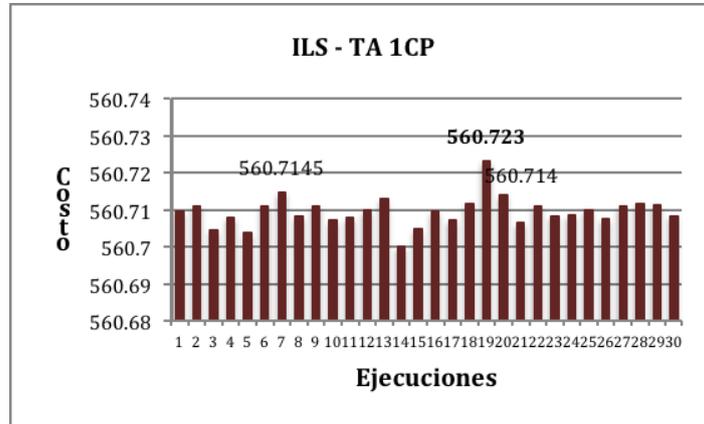


Fig. 3. Resultado de cada una de las Estructuras de Vecindad donde se muestra la estructura ganadora.





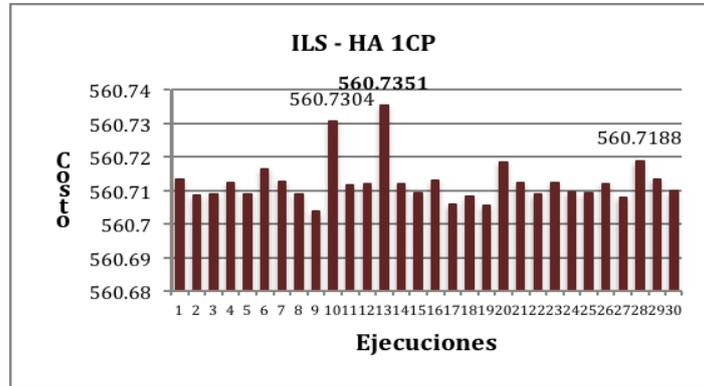


Fig. 4. Resultados de las ejecuciones de cada una de las cinco Estructuras de Vecindad para seleccionar a la mejor. Todas las pruebas se realizaron en 989000 iteraciones.

Una vez que se determinó la mejor Estructura de Vecindad, se probó con diferentes Criterios de Paro para realizar el ajuste. La siguiente prueba realizada fue únicamente con la Estructura de Vecindad Híbrida Aleatoria, la cuál resultó ser la mejor de las cuatro estructuras. Los porcentajes manejados (basados en un Criterio de Paro de 989000) fueron: 5%, 10%, 20%, 30%, 40%, 50%, 60%, 70%, 80%, 90% y 100% (con esta ya se cuenta, Gráfica 2). Estas pruebas sirvieron para determinar el valor correcto del Criterio de Paro y ajustarlo para iniciar la sintonización de los parámetros de control del Algoritmo de Recocido Simulado.

Tabla 7. Resultados del Híbrido Aleatorio con pruebas desde el 5% al 100%

ESTRUCTURA	MEJOR	PEOR	PROM. MEJOR	σ PROM
Híbrido A 5%	560.5685	540.5428	559.5534767	1.332514519
Híbrido A 10%	560.7272	544.0187	560.56363	1.355543374
Híbrido A 20%	560.7178	547.6995	560.6444533	0.730190119
Híbrido A 30%	560.7346	559.7758	560.6943067	0.248209605
Híbrido A 40%	560.733	554.9217	560.7091967	0.16541446
Híbrido A 50%	560.7333	559.1024	560.7089333	0.054319031
Híbrido A 60%	560.727	560.569	560.7116867	0.030341118
Híbrido A 70%	560.7346	560.5694	560.7120367	0.031377934
Híbrido A 80%	560.7247	560.5698	560.71228	0.036617864
Híbrido A 90%	560.7212	560.57	560.7114067	0.031654708
Híbrido A 100%	560.7351	560.5701	560.7122467	0.039025684

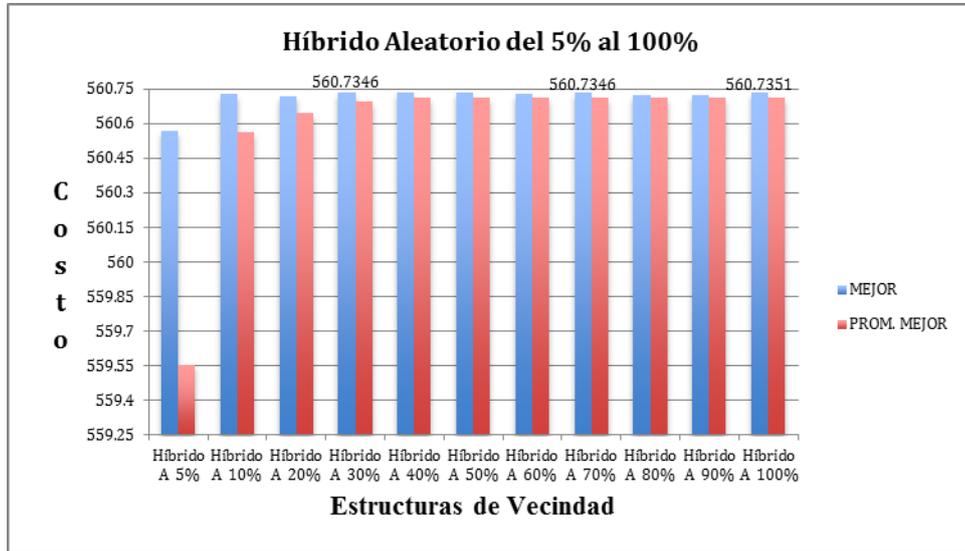
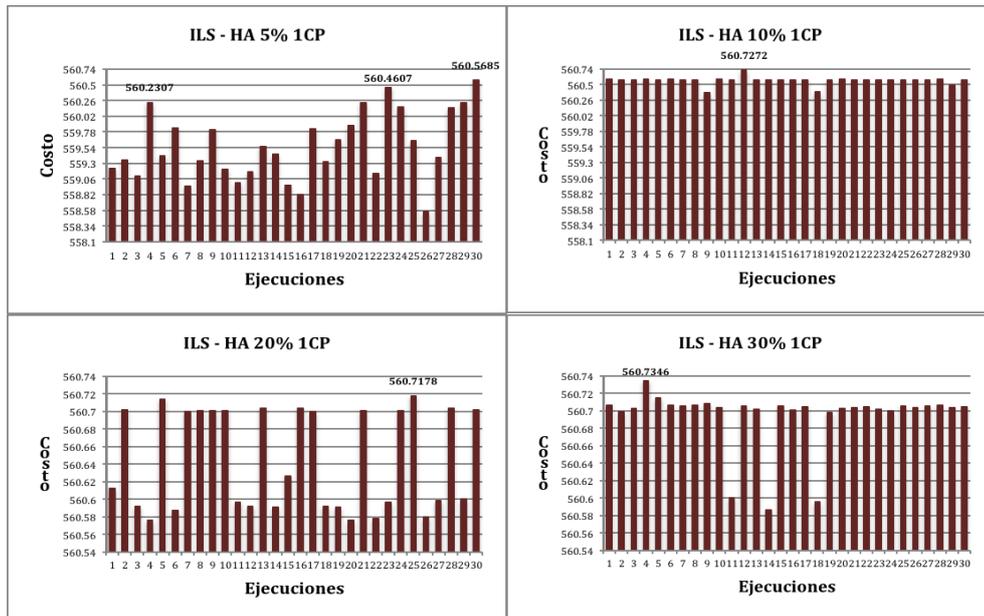


Fig. 5. Resultados comparativos del Híbrido Aleatorio evaluadas desde un 5% hasta 100%. Resultados para realizar el ajuste al Criterio de Paro.



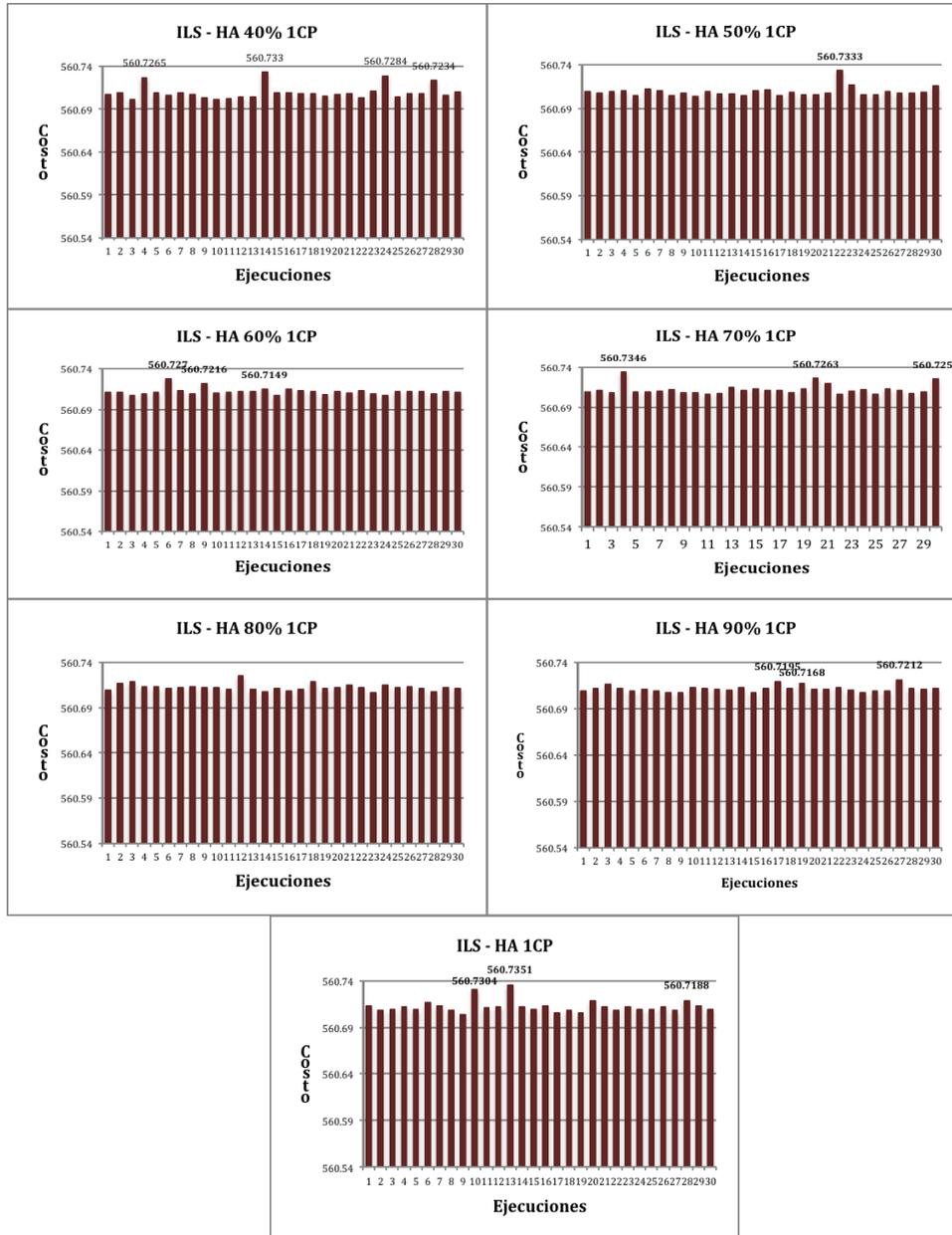


Fig. 6. Resultados de las ejecuciones de la Estructura de Vecindad Híbrida, evaluadas con un Criterio de Paro que van del 5% al 100% para determinar el tamaño de la Estructura de Vecindad.

Cómo la diferencia entre los costos de la Estructura de Vecindad Híbrida con un Criterio de Paro al 100% y al 70% no es mucha, se aplicó este tamaño del mismo y comparó el Método Simulado para que iniciara la sintonización de la resistencia de un acero microaleado con el tipo de acero al Algoritmo de Recocido Simulado para iniciar la sintonización del mismo y comparar los resultados.

Conclusiones y Trabajos Futuros

Como conclusión del presente trabajo de investigación sobre el uso de los métodos de optimización para la búsqueda de una solución cercana a la óptima, tenemos que, la Estructura de Vecindad Híbrida, de acuerdo al análisis realizado, demostró ser la más calificada para ser aplicada a este problema.

La Estructura de Vecindad Híbrida aplicada al Algoritmo de Recocido Simulado, tiene como variable la composición química del acero. Dicha Estructura de Vecindad en conjunto con el Algoritmo de Recocido Simulado, dará la pauta para saber si el resultado es el que se espera, maximizar la resistencia de un acero microaleado.

Referencias

- [1] Barret, C.S., Massalski, T.B. (1966) Structure of Metals. 3rd ed. New York. McGraw Hill Book Company.
- [2] Cruz-Chávez, Martínez-Oropeza, A. (2010). Estructura Híbrida de Vecindad para Problemas de Optimización Discreta. Robotics and Automotive Mechanics Conference, CERMA 2010, IEEE-Computer Society, ISBN 978-0-7695-4204-1, pp , September 28 - October 1, México, 2010.
- [3] Jack, T.H., Jack, K.N. (1973). Materials Science and Engineering 11, p. 1.
- [4] Joyanes, A. L., Zahonero, M. I. Programación en C: Metodología, algoritmos y estructura de datos. ISBN: 8448124871. McGraw-Hill, Primera Edición 2000.
- [5] Khebbache, S., Prins, C., Yalaoui, A., Iterated Local Search Algorithm for the Constrained Two-Dimensional Non-Guillotine Cutting Problem. ICD-LOSI, University of Technology of Troyes, 10010 Troyes cedex, France.
- [6] Krauss, G. (1981). Steels: Heat Treating and Processing Principles. Materials Park. ASM International, 1990. W.C. Leslie The Physical Metallurgy of Steels. New York. McGraw Hill Book Company, 1981.
- [7] Michalewicz Z., Fogel D. B. How to Solve it: Modern Heuristics. Springer –Verlag Berlin Heidelberg 2000,2004. Germany.
- [8] Morrison, W. B. (2000). Past and Future Development of HSLA Steels. The Fourth International Conference on HSLA Steels. October 30- November 2, 2000. Xi'an, China.

- [9] W. Xu, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, S. van der Zwaag. (2009). A Combined Optimization of Alloy Composition and Aging Temperature in Designing New UHS Precipitation Hardenable Stainless Steels. *Computational Materials Science* 45, 467–473.
- [10] Pickering, F. B. (1992). *Materials Science and Technology-A Comprehensive Treatment, Constitution and Properties of Steel*.
- [11] Steve, W., Haynes, A. G. (1956), *J. Iron Steel Inst. London* 183, 349. Book: *Material Science and Technology Vol. 7 Constitution and Properties of Steel*. Weinheim; New York; Basel; Cambridge. 1992. ISBN: 3-527- 26813-8 (Weinheim); ISBN: 1-56081-190-0 (New York).
- [12] Symposium: Low-Alloy, High-Strength Steels; Nuremberg; May 21-23, 1970; The Metallurgy Companies. International Conference: Proceedings; Micro- alloying '75; Washington, D.C.; Union Carbide Corporation. International Conference: Technology and Applications of High-Strength Steels; Philadelphia, Pa.; October 1983; American Society for Metals. International Conference: Microalloying '95; Pittsburgh, PA; June 11-14, 1995; Iron and Steel Society.
- [13] W. Xu, P.E.J. Rivera-Díaz-del-Castillo, S. van der Zwaag. (2008). Designing nanoprecipitation strengthened UHS stainless steels combining genetic algorithms and thermodynamics. *Computational Materials Science* 44 (2008), 678–689.
- [14] Xu, W., Rivera-Díaz-del-Castillo, P. E. J. and van der Zwaag, S. (2009). Computational design of UHS maraging stainless steels incorporating composition as well as austenitisation and ageing temperatures as optimisation parameters. *Philosophical Magazine*, 89: 20, 1647 — 1661