

95.13 METODOS MATEMATICOS Y NUMÉRICOSFACULTAD DE INGENIERIA
UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES**TRABAJO PRACTICO**
*2do Cuatrimestre 2019***Métodos numéricos aplicados a la Ingeniería de procesos**

Preparado por Ing. Federico Balzarotti

OBJETIVOS

- Experimentar con el uso de métodos numéricos la resolución de ecuaciones diferenciales no lineales.
- Aplicar métodos numéricos de diferentes temas de la materia y ensamblarlos para resolver un problema de mayor relevancia.
- Adquirir conocimientos básicos de la ingeniería de procesos industriales.

INTRODUCCIÓN

Uno de los procesos más comunes de la industria metalúrgica es el tratamiento térmico de aceros. Las múltiples aplicaciones de esta aleación Fe-C (automotriz, petróleo, tuberías, perfiles, etc.) requieren propiedades mecánicas muy diversas.

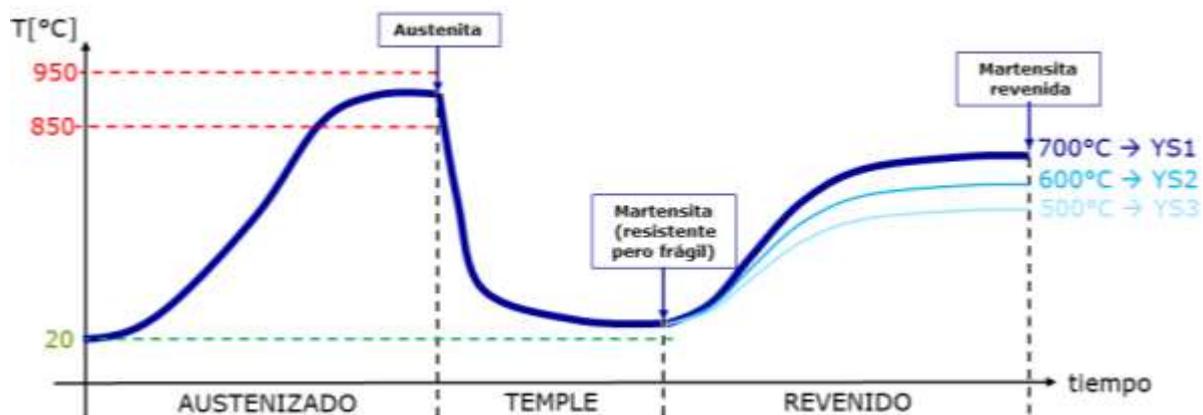
En este sentido, los tratamientos térmicos suelen ser una herramienta versátil y rentable para lograr un objetivo de resistencia mecánica y/o tenacidad.

Para una misma composición química es posible modificar las propiedades mecánicas del acero sometiendo el material a una serie de calentamientos y enfriamientos sucesivos.

Uno de los tratamientos térmicos de gran aplicación en la industria es el *Temple* y *Revenido*, que consiste en las siguientes etapas:

- 1) *Austenizado*: Calentamiento hasta una temperatura de aproximadamente 900°C. En este proceso el material modifica completamente su microestructura (transformación alotrópica) y cambia a la fase Austenita.
- 2) *Temple*: Enfriamiento brusco hasta temperatura ambiente, generalmente utilizando agua. Se obtiene una nueva fase llamada Martensita. En esta condición el material tiene alta resistencia mecánica pero a la vez es muy frágil (baja tenacidad).
- 3) *Revenido*: Nuevo calentamiento hasta una temperatura objetivo. El rango habitual es 500-700°C. A medida que el material se calienta la Martensita disminuye su resistencia mecánica ganando tenacidad. La temperatura final definirá la combinación final de propiedades mecánicas.

En el siguiente esquema se puede visualizar el proceso completo de temple y revenido:



El presente trabajo se focalizará en modelar la evolución temporal de la tercera etapa dicho tratamiento térmico. El material a reventar serán tubos de acero destinados a la industria petrolera. La norma *API* es la encargada de definir los requerimientos de propiedades mecánicas según la profundidad y las condiciones particulares del pozo. En este contexto es necesario contar con un proceso que garantice el producto final dentro de rango de propiedades mecánicas.

Para lograr un proceso continuo de calentamiento, los tubos avanzan dentro de un horno a velocidad constante. Cada cierto intervalo de tiempo (cadencia) un tubo sale del horno a la temperatura objetivo, a la vez un nuevo tubo entra a temperatura ambiente.

Por otra parte, el horno debe tener la suficiente versatilidad para calentar tubos de distintas dimensiones, así como también lograr diferentes objetivos de temperatura. Por este motivo los hornos son diseñados con varias zonas, pudiendo establecer temperaturas independientes en cada una.

PLANTEO DEL PROBLEMA

Se deberá resolver la evolución temporal para un tubo de diámetro externo OD , espesor WT y longitud Lt que viaja con velocidad v_0 a través de un horno de largo L con dos zonas independientes. La primera mitad del horno controla a una temperatura T_1 y la segunda a una temperatura T_2 .

El intercambio de calor entre un sólido y su entorno está dado por la ley de conservación de energía:

$$-mC \frac{dT}{dt} = h_c S (T - T_\infty) + \sigma \varepsilon S (T^4 - T_\infty^4)$$

Donde:

m	[kg]	masa del sólido
C	[J/kg K]	calor específico del sólido
T	[K]	temperatura del sólido
t	[s]	tiempo
hc	[W/ m ² K]	coeficiente de convección
S	[m ²]	área de intercambio de calor por convección/radiación
T _∞	[K]	temperatura del entorno
σ	[W/ m ² K ⁴]	constante de Stefan-Boltzmann
ε	[]	factor de emisividad de la superficie del tubo

El lado izquierdo de la ecuación es la tasa de energía interna almacenada en el sólido, mientras que el lado derecho incluye los intercambios instantáneos de energía por convección y radiación (notar que los términos de la ecuación tienen unidades de potencia). El modelo planteado considera la conductividad térmica del material $\lambda \rightarrow \infty$, es decir que se adopta la hipótesis de sólido de temperatura uniforme (todos los puntos materiales tienen la misma temperatura para un dado instante de tiempo). Se considerará el área de intercambio S igual a la superficie lateral externa del tubo, es decir:

$$S = \pi \cdot OD \cdot L_t$$

La temperatura T_∞ será la temperatura dentro del horno según la zona en la que se encuentre el tubo.

$$T_\infty(x) = \begin{cases} T_1 & x \leq \frac{L}{2} \\ T_2 & x > \frac{L}{2} \end{cases} \quad \text{con} \quad x = v_0 t$$

Los tubos avanzan de manera discreta por un mecanismo llamado *walking-beam* ubicándose en espacios equidistantes llamados *bolsillos*. La *cadencia* es el tiempo en segundos que tarda un tubo en pasar de un bolsillo al siguiente. De este modo, la velocidad v_0 se calcula a partir de los parámetros mencionados:

$$v_0 = \frac{L}{nbols \times cad}$$

Por último la masa m se puede calcular a partir de la densidad del acero ρ y del volumen del tubo:

$$m = \rho \cdot \pi \cdot OD \cdot WT \cdot \left(1 - \frac{WT}{OD}\right) L_t$$

DESARROLLO DEL PRÁCTICO

0) Calcular el número de referencia del grupo asociado a los datos particulares del TP bajo siguiente fórmula:

$$N_{REF} = \text{ROUND} \left((N^\circ \text{padrón1} + N^\circ \text{padrón2}) / 2 \right)$$

*Ejemplo: $N^\circ \text{padrón1} = 99999$ $N^\circ \text{padrón2} = 100000 \rightarrow N_{REF} = \text{ROUND}(99999.5) = 100000$

Calcular el resto de la división $N_{REF}/3$. En base al resultado elegir el método de Runge Kutta asignado futuros cálculos:

resto=0	resto=1	resto=2
Runge Kutta de orden 2	Runge Kutta de orden 3	Runge Kutta de orden 4

Calcular el resto de la división $N_{REF}/4$. En base al resultado elegir la tabla de calor específico en función de la temperatura:

resto=0		resto=1		resto=2		resto=3	
Temp [°C]	C [J/kg K]						
0	480	0	510	0	490	0	500
300	550	400	510	200	560	500	570
900	550	900	580	900	560	900	570

1) Resolver el modelo planteado considerando solamente el intercambio de calor por convección. Aplicar los métodos de *Euler* y *Runge Kutta* (asignado según NREF) para una condición inicial $T_0=20^\circ\text{C}$ y paso de tiempo $h=cad$. Considerar los siguientes datos reemplazando *NREF* donde corresponda:

Propiedades del material	ρ	7850 kg/m ³
	C	Valor promedio de la tabla asignada por NREF en ítem 0)
Geometría del material	OD	244.48 mm
	WT	13.84 mm
	Lt	12 m
Geometría del horno	L	50 m
	$nbol$	50
Parámetros de proceso	cad	ROUND (10 s / 10000 * (NREF - 95000) + 25 s)
	T_1	ROUND (150 °C / 10000 * (NREF - 95000) + 550°C)
	T_2	ROUND (150 °C / 10000 * (NREF - 95000) + 550°C)
Parámetros de la transferencia de calor	hc	20 W/m ² K
	σ	5.6703. 10 ⁻⁸ W/m ² K ⁴
	ϵ	0.85

* Ejemplo: para un padrón NREF=100000 los parámetros de proceso serían: $cad=30\text{s}$, $T_1=625^\circ\text{C}$, $T_2=625^\circ\text{C}$.

**ROUND indica redondeo simétrico al valor entero.

Notar que para este caso particular donde $T_\infty=T_1=T_2$, la solución analítica (exacta) tiene la siguiente expresión:

$$T(t) = T_\infty + (T_0 - T_\infty)e^{-\frac{hcS}{mC}t}$$

- Graficar la temperatura en función del tiempo superponiendo los resultados de cada método junto con la solución exacta.
- Graficar el error relativo cometido con cada método en función del tiempo. Utilizar una escala en el eje vertical que permita visualizar con claridad ambas curvas.
- Obtener conclusiones sobre la precisión de ambos métodos aplicados.

IMPORTANTE: Los cálculos de temperatura y tiempo asociados a la ecuación diferencial deberán realizarse en grados Kelvin [K] y segundos [s], respectivamente. Por otro lado, los resultados (ya sean numéricos o plasmados en gráficos) deberán expresarse en grados Celsius [°C] y minutos [min].

2a) Resolver nuevamente el *ítem 1* teniendo en cuenta la tabla de calor específico en función de la temperatura. Deberá incorporarse esta dependencia en la resolución de la ecuación diferencial. Una opción es realizar interpolación lineal entre valores no conocidos.

2b) Resolver nuevamente el *ítem 1* teniendo en cuenta el intercambio de calor radiativo. Utilizar el calor específico promedio del *ítem 1*.

Aclaraciones:

- Los ítems **2a)** y **2b)** deberán resolverse solamente con el método de Runge Kutta asignado (no Euler).
- Graficar los nuevos resultados de cada caso superponiéndolos con la solución exacta del *ítem 1*. Analizar y decidir si estos agregados al modelo son influyentes o no en la evolución térmica del tubo.

2c) A partir de la evolución temporal obtenida en **2b)** calcular los siguientes *parámetros de salida* del proceso. Estos parámetros son de gran interés porque influyen directamente en las propiedades mecánicas finales del tubo:

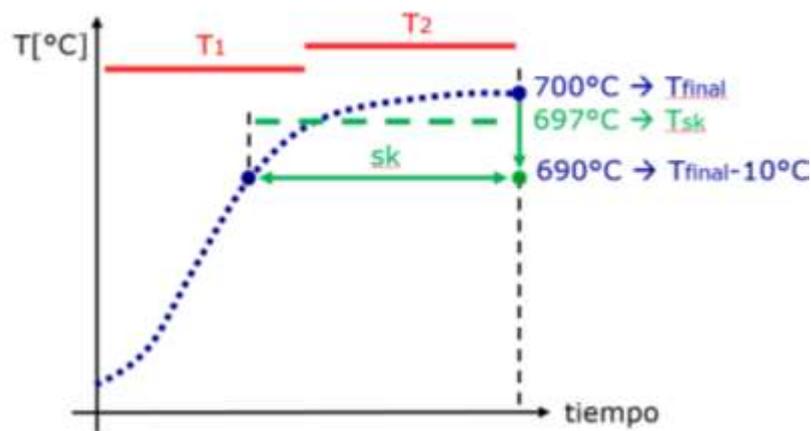
$Sk \rightarrow$ Soaking. Intervalo de tiempo para el cual el material permanece dentro del horno en el rango de temperatura más elevada. Dicho rango se define como $[T_{\text{final}} - 10^\circ\text{C}, T_{\text{final}}]$.

$T_{sk} \rightarrow$ Temperatura promedio durante el *soaking*. Representa la *temperatura objetivo* del proceso de revenido.

En el siguiente gráfico se puede visualizar cualitativamente cada parámetro:

- En color rojo se indican los *parámetros de entrada* al modelo.
- En color verde los *parámetros de salida*.
- En color azul se indica el *modelo numérico desarrollado* (notar que la curva punteada indica una sucesión de puntos y no una función continua).

Los *parámetros de salida* deberán calcularse a partir de los datos de la curva azul.



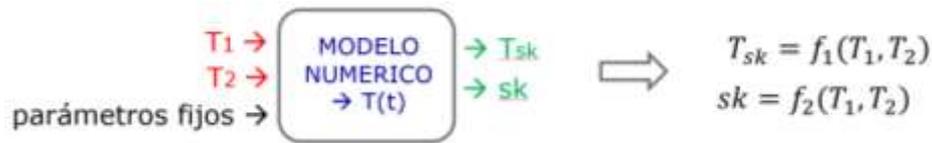
*Aclaración 1: Para el cálculo de ambos parámetros T_{sk} y Sk tener expresado el ciclo térmico en grados Celsius y minutos, respectivamente.

*Aclaración 2: Si bien en el gráfico se observa que T_1 y T_2 son cualitativamente diferentes, los valores a utilizar deben ser los de tabla del ítem 1 (es decir $T_1 = T_2$).

3) Encontrar manualmente una combinación de T_1 y T_2 para que el Sk sea de *10 minutos* manteniendo la T_{sk} obtenida en el ítem 2. La tolerancia para Sk es de $\pm 1 \text{ min}$, y la tolerancia para T_{sk} es de $\pm 2^\circ\text{C}$. El modelo numérico a utilizar debe incluir el término radiativo y el calor específico variable según tabla.

4) Realizar una mejora del ciclo térmico obtenido en el ítem 3 en términos de productividad. Es decir, aumentar la productividad un 15% sin alterar los parámetros metalúrgicos de interés (iguales valores de Sk y T_{sk} con misma tolerancia). El modelo numérico a utilizar debe incluir el término radiativo y el calor específico variable según tabla.

5) Automatizar la búsqueda manual del ítem 3 para encontrar valores de T_1 y T_2 que obtengan un T_{sk} y sk predeterminados. El problema se puede esquematizar de la siguiente forma:



Fijando los parámetros de salida como sk_{obj} y T_{sk-obj} , debería existir una combinación de parámetros de entrada T_1 y T_2 que satisfaga el siguiente sistema no lineal de ecuaciones:

$$\begin{aligned} f_1(T_1, T_2) - T_{sk-obj} &= 0 \\ f_2(T_1, T_2) - sk_{obj} &= 0 \end{aligned}$$

Si bien las funciones f_1 y f_2 no se conocen explícitamente, ambas están definidas por el modelo numérico desarrollado previamente. Los parámetros T_1 y T_2 serán las raíces del sistema formado por F_1 y F_2 :

$$\begin{aligned} F_1(T_1, T_2) &= f_1(T_1, T_2) - T_{sk-obj} = 0 \\ F_2(T_1, T_2) &= f_2(T_1, T_2) - sk_{obj} = 0 \end{aligned}$$

De este modo, es posible plantear un esquema de punto fijo para resolver el problema de manera iterativa:

$$\begin{bmatrix} T_1^{(k+1)} \\ T_2^{(k+1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} T_1^{(k)} \\ T_2^{(k)} \end{bmatrix} - J^{-1} \begin{bmatrix} F_1(T_1^{(k)}, T_2^{(k)}) \\ F_2(T_1^{(k)}, T_2^{(k)}) \end{bmatrix}$$

Según cual sea el jacobiano J , el método será *Newton-Raphson*, *Secante* o algún esquema de *Punto Fijo*. A continuación se detallan las expresiones correspondientes:

$$J_{NR} = \begin{bmatrix} \frac{\partial F_1}{\partial T_1} & \frac{\partial F_1}{\partial T_2} \\ \frac{\partial F_2}{\partial T_1} & \frac{\partial F_2}{\partial T_2} \end{bmatrix}_{T_1^{(k)}, T_2^{(k)}} \quad J_{SEC} = \begin{bmatrix} \frac{F_1^{(k)} - F_1^{(k-1)}}{T_1^{(k)} - T_1^{(k-1)}} & \frac{F_1^{(k)} - F_1^{(k-1)}}{T_2^{(k)} - T_2^{(k-1)}} \\ \frac{F_2^{(k)} - F_2^{(k-1)}}{T_1^{(k)} - T_1^{(k-1)}} & \frac{F_2^{(k)} - F_2^{(k-1)}}{T_2^{(k)} - T_2^{(k-1)}} \end{bmatrix} \quad J_{PF} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Para resolver el sistema no lineal planteado anteriormente se sugiere utilizar un esquema de *Punto Fijo* con el siguiente J :

$$J = \begin{bmatrix} 0.25 & 0.75 \\ 0.75 & 0.25 \end{bmatrix}$$

Las unidades de J están expresadas en grados Celsius y minutos según la celda que corresponda.

Utilizar como criterio de corte 3 dígitos significativos tanto para T_1 como para T_2 .

Se deberá resolver los casos indicados en la siguiente tabla:

caso	sk	Tsk	T ₁	T ₂	N° iteraciones
A	10	Tsk del ítem3			
B	10	ROUND (150 °C / 10000 * (NREF - 95000) + 500°C)			
C	10	ROUND (150 °C / 10000 * (NREF - 95000) + 520°C)			

Completarla con los resultados de temperaturas T_1 , T_2 y el número de iteraciones requerido. Si encuentra otro J que logra también la convergencia puede utilizarlo. Indicarlo claramente en el informe. Utilizar la cadencia original del ítem 1.

Graficar la evolución temporal de los casos A, B y C, indicando los parámetros de entrada y salida (similar al grafico cualitativo del ítem 2).

CONCLUSIONES

Presente sus conclusiones del trabajo práctico. En particular, comente sobre:

- Ecuaciones diferenciales lineales vs no lineales. Ventajas y desventajas de los métodos numéricos frente a los analíticos para cada caso.
- Sistemas de ecuaciones no lineales como herramienta para la resolución de problemas inversos (inferencia de datos de entrada a partir de datos de salida).
- Modificaciones y agregados al modelo planteado para acercarse más a la realidad.