# 75.12 ANÁLISIS NUMÉRICO I

## FACULTAD DE INGENIERIA UNIVERSIDAD DE BUENOS AIRES

## TRABAJO PRACTICO Nº 2

2do Cuatrimestre 2018

## 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.

T[°C]
950

850

Martensita
revenida

700°C → YS1
600°C → YS2
500°C → YS3

AUSTENIZADO TEMPLE REVENIDO

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 revenir 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
С	[J/kg K]	calor especifico del sólido
T	[K]	temperatura del solido
t	[s]	tiempo
hc	$[W/m^2 K]$	coeficiente de convección
S	$[m^2]$	área de intercambio de calor por convección/radiación
$T_{\infty}$	[K]	temperatura del entorno
σ	$[W/m^2 K^4]$	constante de Stefan-Boltzmann
3		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).

La temperatura  $T_{\infty}$  será la temperatura dentro del horno según la zona en la que se encuentre el tubo.

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

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  $\rho$  y del volumen del tubo:

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

## DESARROLLO DEL PRÁCTICO

1) Resolver el modelo planteado considerando solamente el intercambio de calor por convección. Aplicar los métodos de *Euler* y *Runge Kutta de orden 4* para una condición inicial  $T_0$ =20°C y paso de tiempo h=cad. Considerar los siguientes datos reemplazando NP por el número de padrón de uno de los integrantes del grupo:

Propiedades del	ρ	$7850 \text{ kg/m}^3$
material	C	480 J/kg K
Geometría del	OD	244.48 mm
material	WT	13.84 mm
тигени	Lt	12 m
Geometría del horno	L	50 m
Geometria del norno	nbol	50
D ( , 1	cad	ROUND ( -10 s / 10000 * (NP - 90000) + 35 s)
Parámetros de	$T_1$	ROUND ( 200 °C / 10000 * (NP - 90000) + 500°C )
proceso	$T_2$	ROUND ( 200 °C / 10000 * (NP - 90000) + 500°C )
Parámetros de la	hc	$20 \text{ W/m}^2\text{K}$
transferencia de	σ	5.6703. 10 <sup>-8</sup> W/m <sup>2</sup> K <sup>4</sup>
calor	ε	0.85

<sup>\*</sup> Para un padrón NP=100000 los parámetros de proceso serían: cad=25s, T<sub>1</sub>=700°C, T<sub>2</sub>=700°C.

<sup>\*\*</sup>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:

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

- a) Graficar la temperatura en función del tiempo superponiendo los resultados de cada método iunto con la solución exacta.
- b) 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.
- c) Obtener conclusiones sobre la precisión de ambos métodos aplicados.

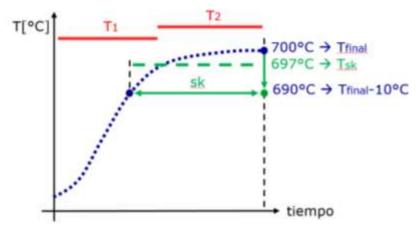
**IMPORTANTE**: Todos los <u>cálculos</u> de temperatura y tiempo deberán realizarse en grados Kelvin [K] y segundos [s], respectivamente. Por otro lado, los <u>resultados</u> (ya sean numéricos o gráficos) deberán expresarse en grados Celsius [°C] y minutos [min].

- 2) Resolver nuevamente el *ítem 1* incorporando el término de intercambio radiativo.
- a) Seleccionar el método que considere más adecuado de acuerdo a los resultados *del ítem 1*. Justificar la elección.
- b) Graficar los nuevos resultados superponiéndolos con la solución exacta del *ítem 1*. Decidir si el intercambio por radiación es despreciable.
- c) A partir de la evolución temporal obtenida en 2a) 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 [ $T_{final}$  -10°C,  $T_{final}$ ].
  - $T_{sk} \rightarrow$  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 proceso
- En color verde los parámetros de salida.
- En color azul se indica el modelo numérico desarrollado.

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



<sup>\*</sup>Aclaración: Si bien en el grafico se observa que  $T_1$  y  $T_2$  son cualitativamente diferentes, los valores a utilizar para resolver los ítems 2a) 2b) y 2c) deben ser los de tabla del ítem 1 ( $T_1=T_2$ ).

- 3) Encontrar manualmente una combinación de  $T_1$  y  $T_2$  para que el Sk sea de Sk sea de Sk manteniendo la Sk obtenida en el Sk sea de Sk es de Sk es
- **4**) 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:

$$\begin{array}{c|c} & T_1 \rightarrow \\ \hline T_2 \rightarrow \\ \text{parametros fijos} \rightarrow \end{array} \xrightarrow{\text{MODELO}} \xrightarrow{\text{NUMERICO}} \xrightarrow{\text{NIMERICO}} \xrightarrow{\text{Sk}} \qquad \Longrightarrow \qquad \begin{array}{c} sk = f_1(T_1, T_2) \\ T_{sk} = f_2(T_1, T_2) \end{array}$$

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:

$$f_1(T_1, T_2) - sk_{obj} = 0$$
  
 $f_2(T_1, T_2) - T_{sk-obj} = 0$ 

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  $F_2$ :

$$F_1(T_1, T_2) = f_1(T_1, T_2) - sk_{obj} = 0$$
  

$$F_2(T_1, T_2) = f_2(T_1, T_2) - T_{sk-obj} = 0$$

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

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

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:

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

Para resolver el sistema no lineal planteado anteriormente se sugiere utilizar el siguiente J:

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

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
$\boldsymbol{A}$	10	Tsk del item3			
В	10	ROUND ( 100 °C / 10000 * (NP - 90000) + 550°C )			
С	10	ROUND ( 100 °C / 10000 * (NP - 90000) + 600°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.

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.