

5 - CÁLCULO DAS FRAÇÕES TRANSFORMADAS POR PROCESSOS DE DIFUSÃO

Como visto no Capítulo 2, no decorrer da têmpera de uma peça de aço ao carbono uma estrutura de fase simples, a austenita, transforma-se idealmente em perlita, bainita e martensita. A transformação em cada uma dessas fases depende do tempo de transformação, da temperatura e da taxa de resfriamento.

Alguns autores, em seus trabalhos, não calcularam as frações parciais obtidas em transformações difusionais por desconsiderarem a influência destas sobre as características termo-mecânicas dos materiais [ARGYRIS, 1985].

Em [Fa-rong,1985], foi considerada apenas a transformação de fase austenita-martensita sendo, portanto, desnecessário o uso de dados das transformações isotérmicas ou de resfriamento contínuo. Esta mesma abordagem foi feita até agora neste trabalho.

Outros autores, como [FUJIO et all] e [INOUE & WANG, 1985], utilizaram diagramas de resfriamento contínuo para estimar a mudança de volume devido a transformação de fase para o cálculo de tensões internas, porém com resultados da predição da cinética de transformação de fase não satisfatórios [NAGASAKA,1993].

Neste Capítulo será abordado o cálculo das frações parciais de constituintes resultantes de transformações difusionais em aços ao carbono e apresentado o resultado de uma análise por elementos finitos do problema termo-estrutural de uma peça submetida a têmpera, quando podem ser formadas, além de martensita, perlita e bainita.

Será sugerido, também, um novo modelo para o cálculo das frações transformadas de perlita e bainita, que leva em consideração tanto a temperatura quanto a derivada desta em relação ao tempo.

5.1 Cálculo das frações transformadas em aços ao carbono

As frações volumétricas das fases transformadas em processos difusionais são determinadas pela expressão de Avrami [AVRAMI,1939], assumindo-se válido o princípio da aditividade, dada genericamente por,

$$\mathbf{x} = 1 - e^{-b t^n} \quad (1)$$

Como encontrado em [NAGASAKA,1993], os parâmetros b e n podem ser obtidos experimentalmente de medições isotérmicas e, segundo [Hawbolt,1983], citado neste mesmo trabalho, a dependência do parâmetro n em relação a temperatura pode ser desconsiderada.

Porém, dados experimentais sobre esses parâmetros não são encontrados para todos os componentes e para qualquer tipo de aço. Desse modo, os parâmetros cinéticos podem ser calculados segundo o procedimento utilizado por [BOKOTA, 1998] e adotado neste trabalho, onde dada a fração transformada em dois diferentes instantes em uma dada temperatura \mathbf{q} , tem-se um sistema de duas equações não lineares nas variáveis b e n . Considerando-se o princípio da aditividade e, em particular, que no tempo de início da transformação por resfriamento, t_s , a fração transformada é igual a 0,01 e no tempo de término da transformação por resfriamento, t_f , a fração parcial é igual a 0,99, chega-se as seguintes expressões para as frações parciais de perlita e bainita, respectivamente:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_p(\mathbf{q}, t) &= 1 - e^{-b(\mathbf{q})t^{n(\mathbf{q})}} \\ \mathbf{x}_b(\mathbf{q}, t) &= (1 - \mathbf{x}_p) \left(1 - e^{-b(\mathbf{q})t^{n(\mathbf{q})}} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

onde $b(\mathbf{q})$ e $n(\mathbf{q})$ são as constantes cinéticas dadas por

$$n(\mathbf{q}) = \frac{\ln\left(\frac{\ln(1 - \mathbf{h}_f)}{\ln(1 - \mathbf{h}_s)}\right)}{\ln\left(\frac{t_s}{t_f}\right)} \quad (3)$$

e

$$b(\mathbf{q}) = \frac{-\ln(1-\mathbf{h}_s)}{(t_s)^{n(\mathbf{q})}} \quad (4)$$

com $\mathbf{h}_s = 0,01$, $\mathbf{h}_f = 0,99$, e $t_s = t_s(\mathbf{q})$ e $t_f = t_f(\mathbf{q})$, sendo os valores de t_s e t_f obtidos de diagramas TTT ou CCT.

A fração volumétrica da martensita, cuja formação é adifusional, é dada pela equação empírica de Koistiner e Marburger [KOISTINER,1959]

$$\mathbf{x}_M(\mathbf{q}) = (1 - \mathbf{x}_p - \mathbf{x}_b) \left(1 - e^{-0,011(M_S - \mathbf{q})}\right) \quad , \quad \mathbf{q} < M_S \quad (5)$$

onde M_S é a temperatura de início da transformação martensítica. Além disso, o princípio da aditividade fornece a fração volumétrica da austenita retida, dada por $\mathbf{x}_a = 1 - \mathbf{x}_p - \mathbf{x}_b - \mathbf{x}_m$.

Como citado anteriormente, na Seção 5.3 será apresentada uma nova formulação, onde será considerada a influência da taxa de resfriamento sobre o cálculo das frações parciais em transformações difusionais, ou seja, os parâmetros cinéticos serão considerados como funções de \mathbf{q} e de $\dot{\mathbf{q}}$.

5.2 Exemplo numérico

Este exemplo trata da têmpera de um cilindro de aço ao carbono de alta temperabilidade resfriado por jato de água de alta pressão.

O cilindro tem 75mm de diâmetro e 180mm de comprimento, e foi austenizado a 880°C e a temperatura de início da transformação martensítica é 400°C.

Por falta de dados confiáveis, optou-se pela utilização das características termo-mecânicas do aço 3.25Ni-1Cr [NAGASAKA,1993] do Exemplo 4.5.1, Seção 4.5 deste trabalho, juntamente com as curvas de resfriamento istoérmico do aço AISI 4340 [LESLIE]. Por ser um aço ao carbono, a peça está sujeita a transformações difusionais. A malha de elementos finitos utilizada é a mesma do exemplo citado.

Na figura 5.1 abaixo apresenta-se a distribuição da concentração de bainita na seção longitudinal da peça, após 100 segundos de têmpera. O aumento da concentração de bainita ao longo do tempo no ponto A assinalado está representado na figura 5.2.

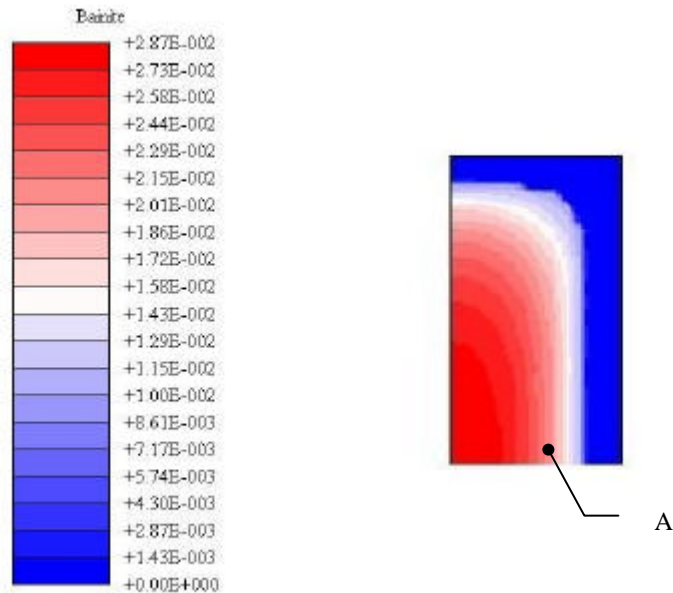


Figura 5.1: distribuição de concentração de bainita após 100s de têmpera

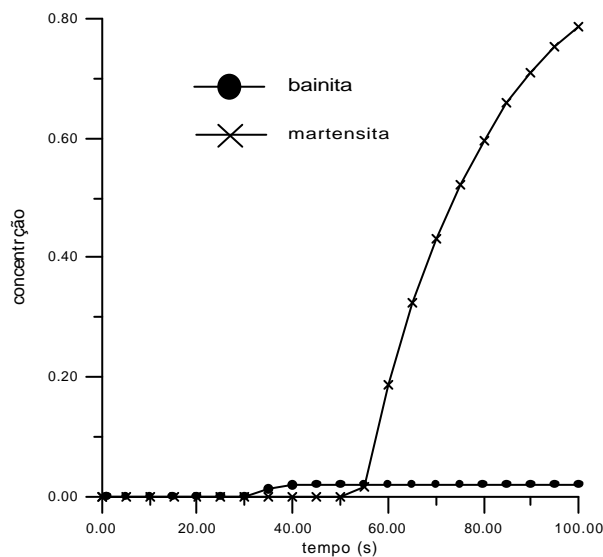


Figura 5.2: concentração de bainita e martensita no ponto A

Na figura 5.3 abaixo estão representadas as curvas de resfriamento isotérmico para o aço AISI 4340, bem como a temperatura no ponto A ao longo do tempo:

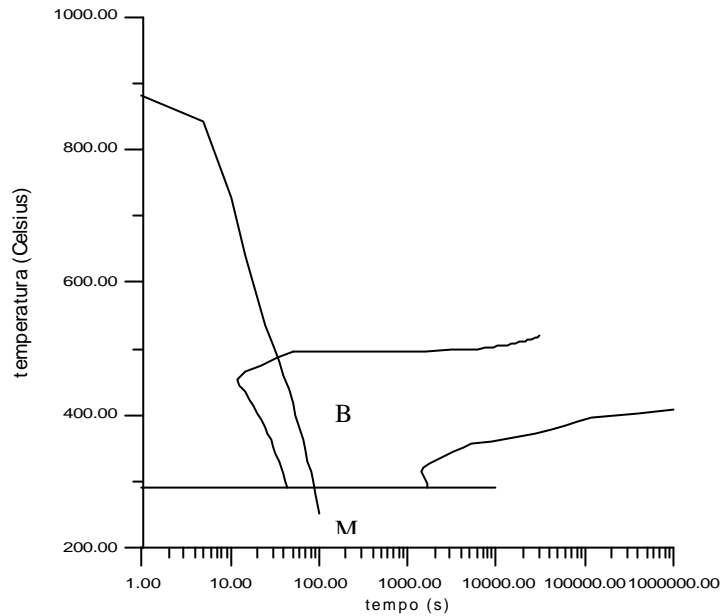


Figura 5.3: evolução da temperatura no ponto A ao longo do tempo e curvas de transformação isotérmica

Na figura 5.4 estão representadas a evolução da temperatura no ponto A juntamente com as curvas de resfriamento contínuo para o aço AISI 4340, referentes a x_B igual a 0.01, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9 e 0.99. Nota-se então que o valor obtido para a fração transformada de austenita em bainita está coerente com o resultado esperado.

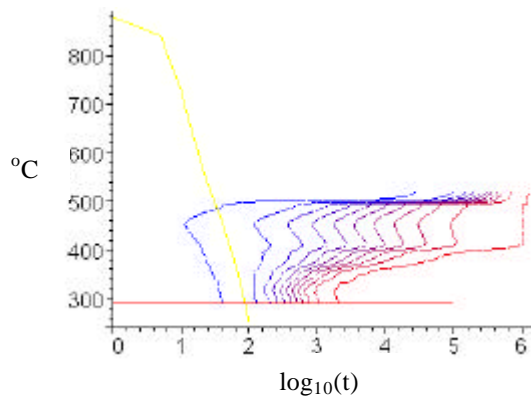


Figura 5.4: evolução da temperatura no ponto A e curvas de nível da superfície de resfriamento contínuo referentes à transformação bainítica

5.3 Cálculo dos parâmetros cinéticos em função da taxa de temperatura

Segundo [NAGASAKA,1993], autores como [FUJIO et all] e [INOUE & WANG, 1985] utilizaram diagramas de resfriamento contínuo para estimar a mudança de volume devido a transformação de fase para o cálculo de tensões internas, porém com resultados da predição da cinética de transformação de fase não satisfatórios

Com o intuito de obter melhores resultados da predição cinética da transformação de fase em aços ao carbono, foi desenvolvido um algoritmo para o cálculo dos parâmetros cinéticos b e n como funções tanto da temperatura quanto da taxa de resfriamento, ou seja, $b = b(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$ e $n = n(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}})$.

No esquema utilizado no exemplo apresentado na seção 5.2, e abordado em [NAGASAKA,1993], uma vez que a transformação difusional tenha iniciado, supõe-se que o tempo de início da transformação, t_s , e o tempo de término da transformação, t_f , são aqueles considerando-se que a transformação ocorreu isotermicamente. Assim, é possível obter uma superfície, aqui chamada de *superfície de fração transformada*, que, para o caso do aço AISI 4340 do exemplo da seção 5.2, é o gráfico da função

$$\mathbf{x}_b(\mathbf{q}, t) = (1 - \mathbf{x}_p) \left(1 - e^{-b(\mathbf{q}) t^{n(\mathbf{q})}} \right) \quad (5)$$

com $\mathbf{x}_p=0$ e está representada na figura 5.5 abaixo, onde os valores no eixo x são referentes a $\log_{10}(t)$.

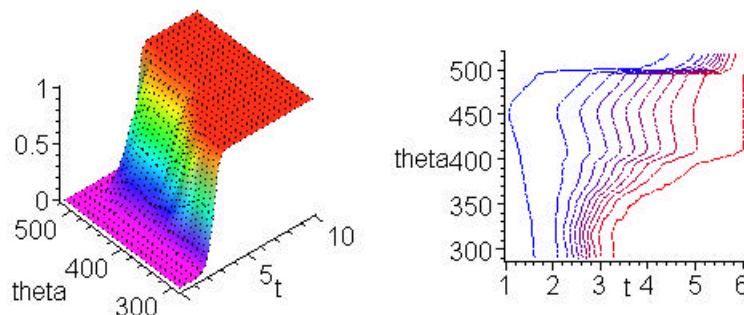


Figura 5.5: representação da superfície de fração de bainita transformada baseada na curva de transformação isotérmica do aço AISI 4340

De modo a considerar a influência da taxa de resfriamento, supõe-se que o tempo de início da transformação é aquele em que o ponto (q, t) passa a estar contido na região de transformação, definida pelo diagrama de resfriamento isotérmico, e o tempo de término da transformação é estimado efetuando-se uma busca em linha do ponto de máximo da função (5) na direção da derivada da temperatura em relação ao tempo, \dot{q} .

Como ilustração, considera-se a temperatura do ponto A do exemplo da seção 5.2 no instante $t=55s$, como representado na figura 5.6 (ponto P). Pela formulação adotada nas referências e também no exemplo 5.2, os tempos de início e de término da transformação bainítica são, respectivamente, iguais a $t_s=21.35s$ e $t_f=140622.2s$, fornecendo a quantidade de fração transformada $x_b=0.01924$.

Segundo o esquema proposto acima, considerando-se a taxa de resfriamento, obtêm-se novos valores para os tempos de início e término da transformação, dados por $t_s^*=34s$ e $t_f^*=105s$. A fração parcial de bainita no instante t_f^* é calculada associando-se a fração parcial de bainita calculada neste instante com $q=290^\circ C$, considerando-se que a transformação ocorreu isotermicamente (figura 5.6).

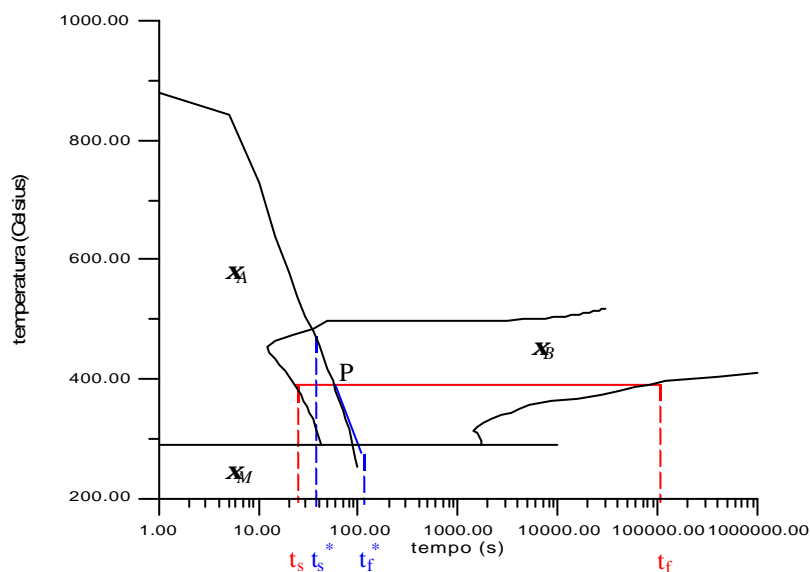


Figura 5.6: comparação entre os valores de t_s e t_f calculados pelos diferentes esquemas

Este esquema do cálculo dos parâmetros cinéticos foi implementado e testado utilizando os mesmos dados do exemplo da seção 5.2.

O erro relativo entre os valores obtidos ao término da transformação para a fração parcial de bainita no ponto considerado é de cerca de 4,5%.

A figura seguinte apresenta a evolução de fração transformada de bainita no ponto A do exemplo da seção 5.2, considerando o esquema proposto pela literatura e adotado no exemplo citado e o esquema proposto nesta seção.

Em etapas posteriores deste trabalho de pesquisa será estudada a influência dos novos valores para a fração transformada, como proposto nesta Seção, sobre as tensões residuais geradas em processos de têmpera.

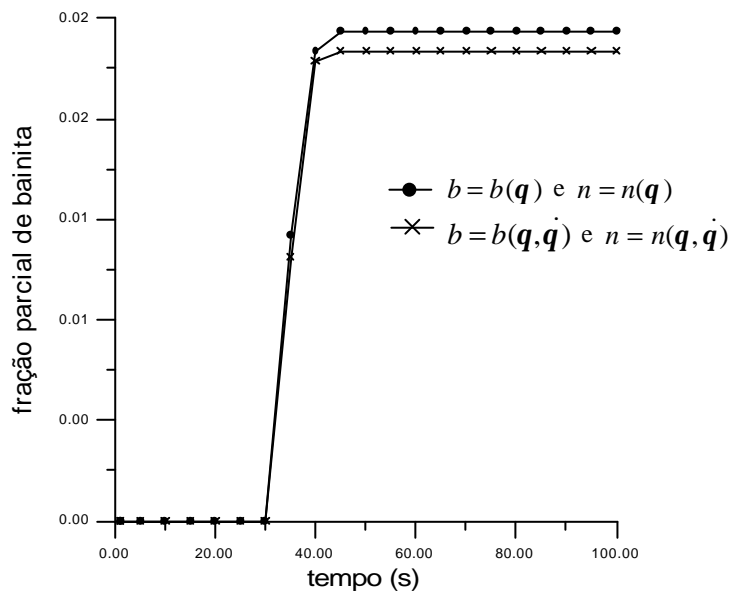


Figura 5.7: fração parcial de bainita : comparação entre os métodos

Para estudar a influência da taxa de resfriamento sobre os resultados obtidos no cálculo das frações transformadas, foram efetuadas duas análises termo-micro-estrutural com os

dados do exemplo da seção 5.2. Não foi considerada a geração de calor pela transformação de fase para que fossem estudadas apenas a variação da fração transformada de bainita.

Na primeira análise foi considerado o resfriamento de um cilindro de aço inicialmente a 400°C, com diversos valores do coeficiente de transferência de calor, gerando então distribuições de temperatura com gradientes térmicos diferentes.

A figura 5.8 apresenta a evolução da temperatura no ponto central do cilindro

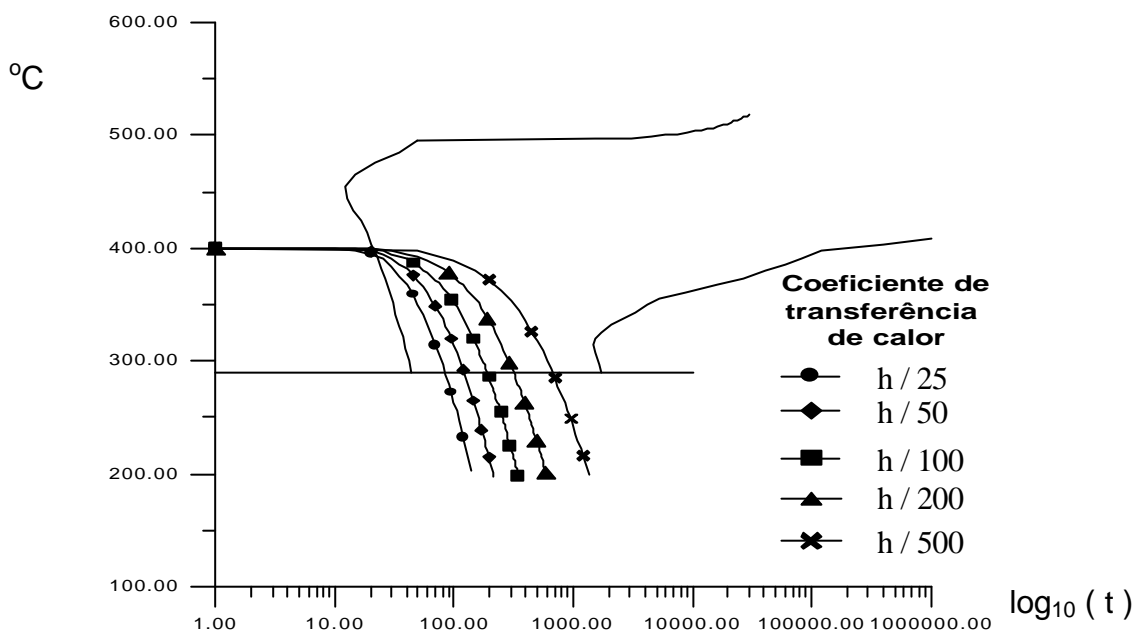


Figura 5.8: evolução da temperatura no ponto central da peça, para diversos valores de h

Os gráficos da figura 5.9 abaixo representam a variação do módulo do vetor de fração parcial de bainita em relação à temperatura.

Nota-se que a diferença na cinética da transformação entre os métodos é tanto maior quanto menor a taxa de resfriamento empregada, apesar dos resultados finais não diferirem de modo considerável.

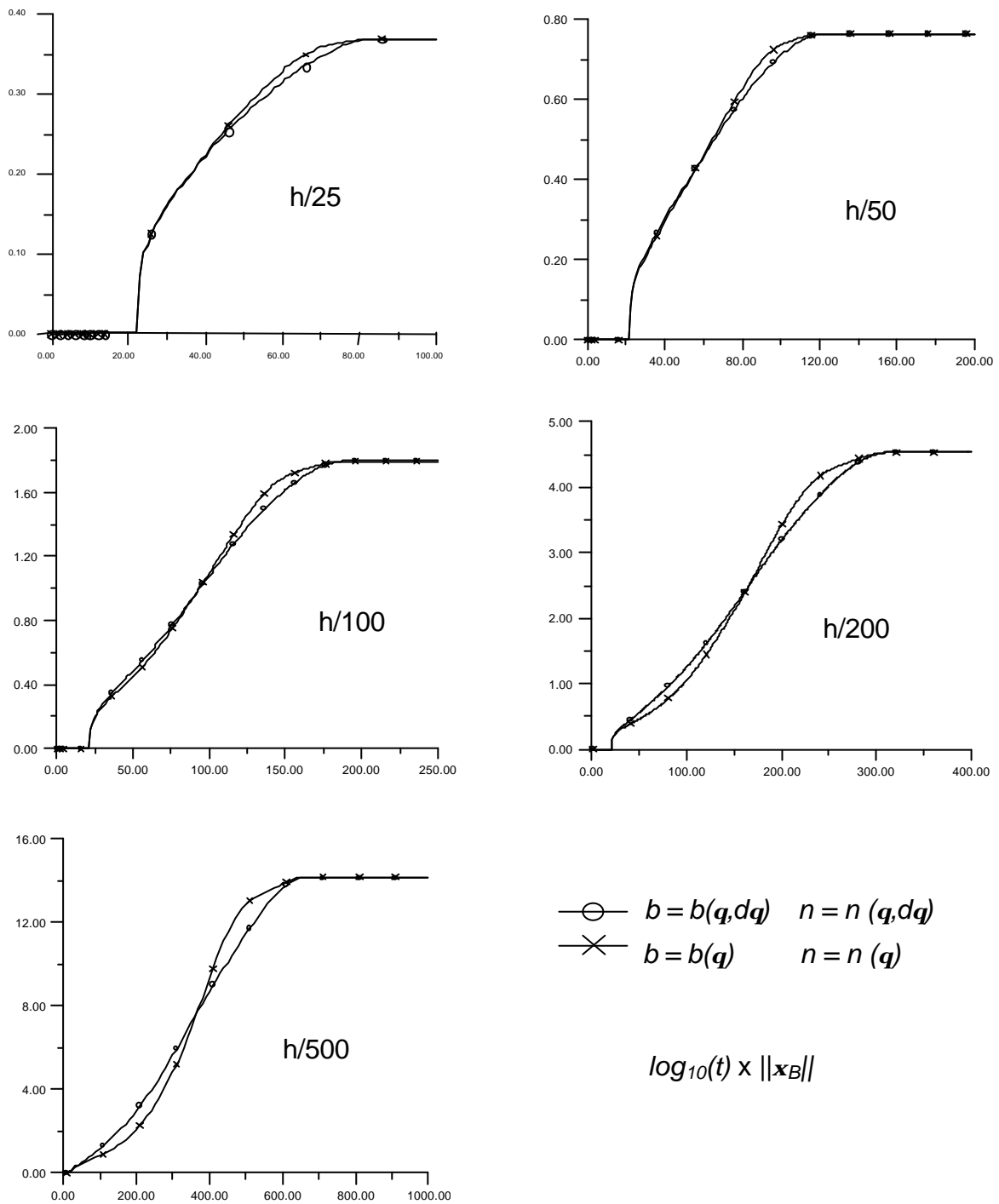


Figura 5.9: comparação entre o esquema proposto e o clássico, para o cálculo das frações transformadas (módulo do vetor de fração parcial de bainita ao longo do tempo).

Na segunda análise foi considerado a têmpera de um cilindro de aço inicialmente a 880°C para dois valores do coeficiente de transferência de calor, gerando então distribuições de temperatura com gradientes térmicos diferentes.

A figura 5.10 apresenta a evolução da temperatura no ponto central do cilindro e a figura 5.11 a comparação entre os esquemas de cálculo das frações parciais transformadas, através do gráfico do módulo da fração parcial de bainita em relação ao tempo.

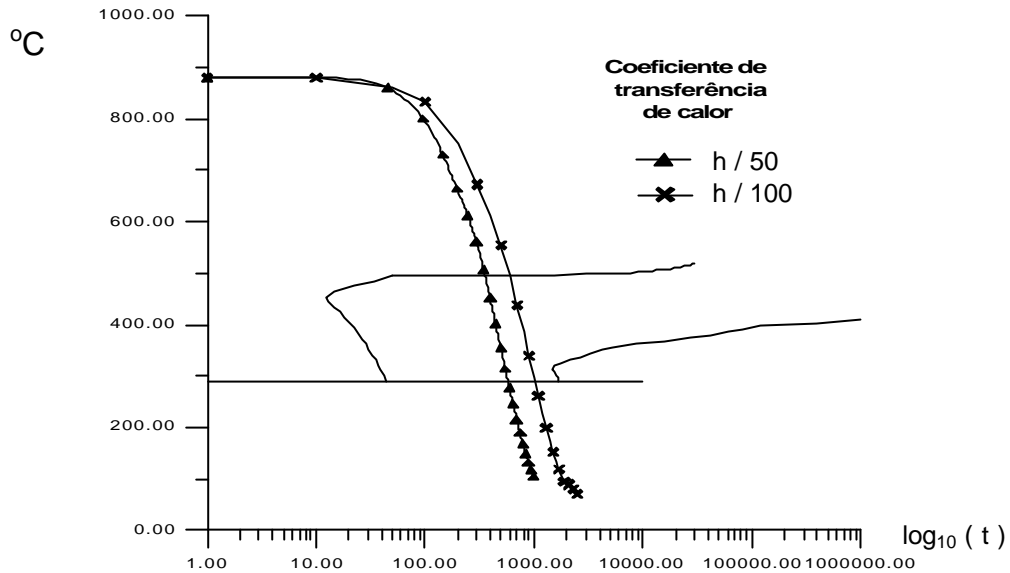


Figura 5.10: evolução da temperatura no ponto central da peça durante a têmpera, para dois valores de h

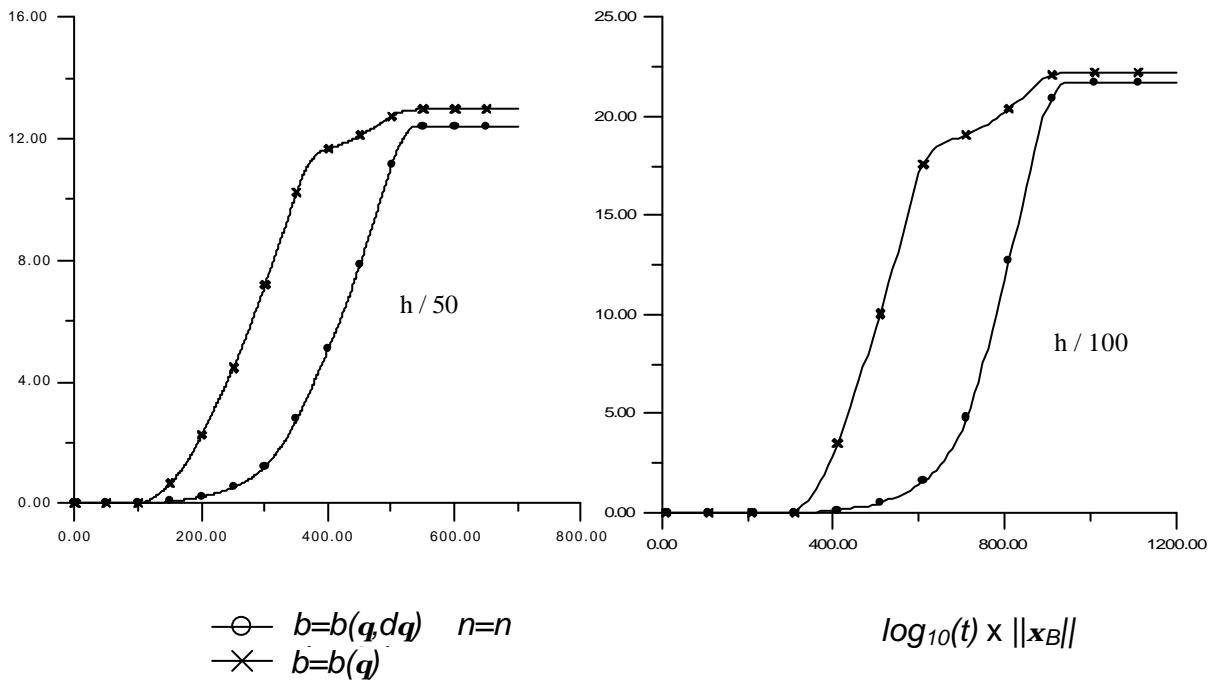


Figura 5.11: comparação entre o esquema proposto e o clássico, para o cálculo das frações transformadas na têmpera de um cilindro (módulo do vetor de fração parcial de bainita ao longo do tempo).

Nota-se que a diferença na cinética da transformação entre os métodos é tanto maior quanto menor a taxa de resfriamento empregada.

No resultado obtido pelo método clássico, nota-se que a curva não apresenta um perfil exponencial em sua parte superior. Isso deve-se ao fato de, por falta de dados, ter sido considerado um valor máximo constante para o tempo de término da transformação bainítica ($t_f = 10^{10}$) na implementação computacional. Acredita-se que, apesar disso, os resultados finais não foram influenciados de maneira considerável.

Conclui-se então que a inclusão da taxa de resfriamento no cálculo das frações parciais transformadas adifusionalmente influencia a cinética da transformação, bem como os resultados finais obtidos, principalmente em tratamentos térmicos onde há uma grande variação de temperatura e resfriamento lento.

Apesar de não haver dados experimentais para validação dos resultados obtidos nesta seção, acredita-se que a inclusão da taxa de resfriamento nesses cálculos represente melhor o fenômeno do que o método anteriormente utilizado.

6 - CONCLUSÕES

Materiais metálicos apresentam um complexo comportamento durante processos térmicos envolvendo mudança de fase, difusionais ou não, durante a têmpera de peças de aço. Sendo assim, torna-se imprescindível a inclusão de deformações causadas por transformação em estimativas numéricas de tensões térmicas residuais .

Neste trabalho de pesquisa foram desenvolvidas formulações para análise numérica por elementos finitos para os problemas térmicos e mecânicos, ambos considerando não-linearidade material, e posteriormente implementados.

A principal dificuldade encontrada no desenvolvimento deste trabalho, além do adequado tratamento numérico necessário dado aos problemas devido às fortes não-linearidades envolvidas, foi a utilização de passos de tempos coerentes com os dois problemas estudados: análise térmica não-linear e de micro-estrutura acoplados e posterior análise termo-elasto-plástica.

Outra dificuldade encontrada, a falta de dados termo-mecânicos para os aços estudados, foi contornada utilizando-se dados de aços com características similares.

Sendo assim, os resultados por hora obtidos estão coerentes qualitativamente, sendo necessário um estudo experimental visando a validação quantitativa dos mesmos.

Os resultados deste estudo confirmam a necessidade de considerar a interação entre os campos de temperatura, de micro-estrutura e de tensões quando do modelamento do processo de têmpera, além da necessidade de incluir o efeito da deformação plástica induzida por transformação, sob o risco de serem obtidas tensões sub-dimensionadas. A importância de incluir este efeito está bem documentada na bibliografia utilizada no desenvolvimento deste trabalho.

As respostas obtidas neste trabalho indicam que este modelo pode ser utilizado para otimizar parâmetros do processo de têmpera, ao menos de forma comparativa. Porém, seu uso fica limitado devido a grande quantidade de dados de entrada requeridos.

Apesar da aparente pequena diferença no erro relativo encontrada entre as frações transformadas calculadas como nas referências citadas e aquelas obtidas com o esquema proposto neste trabalho, acreditamos que em tratamentos térmicos onde o resfriamento seja mais lento, ou em peças de aço maiores, esta diferença seja ainda maior, acarretando estimativas para as frações transformadas bem diferentes daquelas obtidas até então. Além disso, em etapas seguintes desta pesquisa, serão analisadas mais detalhadamente a influência desses novos valores sobre as tensões residuais geradas em processos de tratamento térmico em aços.

Por fim, sugere-se a utilização de curvas CCT para o cálculo das frações transformadas, visando uma melhor estimativa da cinética das transformações de fase.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ABBASI, F., & FLETCHER, A. J. 1985 – *Materials Science and Technology*, v. 1, pp. 830-837
2. AMERICAN SOCIETY OF METALS, 1977 – *Atlas of isothermal transformation and cooling transformation diagrams*
3. ARGYRIS, J. H., SZIMMAT, J. & WILLAM K. J. 1985 – *Finite Element Analysis of arc-welding processes. Numerical Methods in heat transfer*, v. 111, pp. 1-34
4. ARPACI, V. S. 1966 – *Conduction Heat Transfer*. Wesley Publ. Co.
5. AVRAMI, M. – Kinetics of phase change. *Journal of Chemical. Physics*, I 1939, v. 7, pp. 1103, II 1940, v. 8, pp. 212, III 1941, v. 9, pp. 171
6. BOKOTA, A. & ISKIERKA, S. 1998 – Numerical Analysis of phase transformations and residual stresses in steel cone-shaped elements hardened by induction and flame methods. *Int. J. Mech. Sci.*, v. 40, no. 6, pp. 617-629
7. CAMARÃO, A. F. 1998 – Um modelo para previsão de tensões residuais em cilindros de aço temperados por indução. Tese de doutorado USP, 107 p.
8. CHIAVERINI, V. 1965 – Aços-carbono e aços-liga. Publicação da Associação Brasileira de Metais, 456p.
9. COOK, R. D., MALKUS, D. S. & PLESHA, M. E. 1989 – *Concepts and Applications of Finite Element Analysis*. John Wiley & Sons, 630 p.
10. DENIS, S., GAUTIER, E., SIMON, A. & BECK, G. 1985 – Stress-phase-transformations – basic principles, modeling and calculation of internal stresses. *Materials Science and Technology*, v. 1, pp. 805-814
11. DOLTSINIS, I. 2000 – *Elements of Plasticity - Theory and Computation*. WITpress, 311p
12. FA-RONG, Y., SHANG-LI, W. 1985 – Transient-temperature and residual-stress fields in axisymmetric metal components after hardening. *Materials Science and Technology*, v. 1, pp. 851-856
13. FERNANDES, F. M. B., DENIS, S. & SIMON, A. 1985 – Mathematical model coupling phase transformation and temperature evolution during quenching of steels. *Materials Science and Technology*, v. 1, pp. 838-844
14. FLETCHER, A. J. & PRICE, R. F. Novembro de 1981 – Generation of thermal stress and strain during quenching of low-alloy steel plates. *Metals Technology*, pp. 427-446

15. FLETCHER, A. J. 1989 - Thermal Stress and Strain Generation in Heat Treatment. Elsevier Applied Science, 246 p.
16. GIUSTI, J. 1981 – Tese. Université Pierre e Marie Curie. Paris
17. GREENWOOD, G. W. & JOHNSON, R. M. 1965 – Proc. R. Soc. 283A, pp. 403
18. HAWBOLT, E. B., CHAU, B. & BRIMACOMBE, J. K. 1983 – Metallurgical Transactions A, v. 14A, pp. 1803-1815
19. HUGHES, T. J. R. 1987 - The Finite Element Method: linear static and dynamic finite element analysis. Prentice-Hall International Editions
20. HUGHES, T. J. R. 1977 - Unconditionally Stable Algorithms for Nonlinear Heat Conduction. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 10, pp 135-139
21. INOUE, T., NAGAKI, S., KISHIMO, T., MONKAWA, M. 1981 – Description of Transformation Kinetics, Heat Conduction and Elastic-Plastic Stress in the Course of Quenching and Tempering of Some Steels. Ingenieur-Archiv, v. 50, pp315-327
22. INOUE, T. & WANG, Z. 1985 - Coupling between stress, temperature and metallic structures during processes involving phase transformations. Materials Science and Technology, v. 1, pp. 845-850
23. KOISTINER, D. P., MARBURGER, R. E. 1959 – A general equation prescribing the extent of austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels. Acta Metallurgica, v. 7, pp 59
24. LEBLOND, L. B., MOTTET, G., DEVAUX, J. & DEVAUX, J. -C. 1985 - Mathematical models of anisothermal phase transformations in steel, and predicted plastic behaviour. Materials Science and Technology, v. 1, pp. 815-822
25. LESLIE, W. C. – The Physical Metallurgy of steel. Tech Books, 396 p.
26. NAGASAKA, Y., BRIMACOMBE, J. K., HAWBOLT, E. B., SAMARASEKERA, I. V., HERNANDEZ-MORALES, B. & CHIDIAC, S., E. 1993 – Mathematical model of phase transformations and elasto-plastic stress in water spray quenching of steel bars. Metallurgical Transactions A, v. 24A, pp. 795-808
27. OWEN, D. R. & HINTON, E. 1980 – Finite Elements in Plasticity. Pineridge Press Limited, 594 p.
28. PORTER, D. A. & EASTERLING, K. E. 1992 – Phase Transformations in Metals and Alloys. Chapman & Hall, 514 p.
29. SIMO, J. C. & HUGHES, T. J. R. 1988 – Computational Aspects. Pré-impressão, 323 p.

30. SJÖSTRÖM, S. 1985 – Interactions and constitutive models for calculating quench stress in steel. *Materials Science and Technology*, v. 1, pp. 823-828
31. SMITH, W. F. 1993 – *Structure and Properties of Engineering Alloys*. McGraw-Hill, 630 p.
32. TEIXEIRA, M. G. 1996 – Análise térmica e termo-elástica de sólidos pelo método dos elementos finitos. Dissertação de mestrado. IM/UFRJ, 78 p.
33. VAN VLACK, L. H. 1970 – *Princípios de Ciências dos Materiais*. Editora Edgard Blücher LTDA, 427 p.
34. ZIENKIEWICZ, O. C., VALLIAPPANT, S. & KING, I. P. 1969 – Elasto-plastic solutions of engineering problems ‘initial stress’, finite element approach. *Int. J. for Numerical Methods in Eng.*, v. 1, pp. 75-100.

ÍNDICE

Austenita
Bainita
Cúbico de fase centrada (CFC)
Cúbico de corpo centrado (CCC)
martensita
Núcleo
Nucleação
Perlita