

UM MODELO NUMÉRICO PARA CÁLCULO DAS FRAÇÕES PARCIAIS DAS FASES FORMADAS POR DIFUSÃO DURANTE TRATAMENTO TÉRMICO POR TÊMPERA EM AÇOS

Marcello G. Teixeira* and Carlos S. C. Viana†

Instituto Militar de Engenharia
Praça General Tibúrcio, 80, Praia Vermelha, Rio de Janeiro, Brasil, CEP 22290-270

* e-mail: marcello@epq.ime.eb.br, web page: <http://www.ime.eb.br/~webde1/>

† e-mail: d4viana@epq.ime.eb.br, web page: <http://www.ime.eb.br/~webde4/>

Key words: Mudança de Fase, Tratamento Térmico, Elementos Finitos.

Abstract. *Durante a simulação numérica do tratamento térmico de peças de aço carbono, faz-se necessária a utilização de curvas de transformação isotérmica ou de curvas de resfriamento contínuo para estimar a fração de cada constituinte transformado por difusão, porém com resultados de predição da cinética de transformação de fase não satisfatórias¹. Neste trabalho é 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-micro-estrutural de uma peça submetida a têmpera, quando podem ser formadas, além de martensita, perlita e bainita. É sugerido, também, um novo modelo numérico para o cálculo das frações transformadas de perlita e bainita, que leva em consideração tanto a temperatura quanto a taxa de resfriamento. Serão apresentadas comparações entre os resultados obtidos com o modelo utilizado por outros autores e os resultados obtidos pelo modelo proposto neste trabalho.*

1 INTRODUÇÃO

No decorrer da têmpera de uma peça de aço 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 materiais¹.

Alguns autores⁵⁻¹⁴ consideraram apenas a transformação de fase austenita-martensita sendo, portanto, desnecessário o uso de dados das transformações isotérmicas ou de resfriamento contínuo.

Outros autores¹²⁻¹³ utilizaram diagramas de resfriamento contínuo para estimar a mudança de volume devido à transformação de fase para o cálculo de tensões internas, porém com resultados da predição da cinética de transformação de fase não satisfatórios¹¹.

Na Seção 2 será apresentado um esquema de cálculo das frações transformadas em processos de difusão utilizado até então. Na Seção 3 é apresentado um novo esquema de cálculo que leva em consideração não apenas a temperatura, mas também a taxa de resfriamento, com o objetivo de melhorar a predição da cinética das transformações de fase por processo de difusão. Na Seção 4 são apresentados alguns exemplos de simulação numérica do processo de têmpera, efetuando-se uma comparação entre os resultados obtidos através dos esquemas acima citados.

2 CÁLCULO DAS FRAÇÕES TRANSFORMADAS EM AÇOS AO CARBONO

As frações volumétricas das fases transformadas em processos difusionais são determinadas pela expressão de Avrami², assumindo-se válido o princípio da aditividade, dada genericamente por

$$\xi = 1 - e^{-bt^n} \quad (1)$$

onde os parâmetros b e n podem ser obtidos experimentalmente de medições isotérmicas¹¹ e a dependência do parâmetro n em relação à temperatura pode ser desconsiderada⁶.

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 no trabalho de Bokota e Iskierka³ onde, dada a fração transformada em dois diferentes instantes em uma dada temperatura θ , 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_i , 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 às seguintes expressões para as frações parciais de perlita e bainita, respectivamente:

$$\begin{aligned}\xi_p(\theta, t) &= 1 - e^{-b(\theta)t^{n(\theta)}} \\ \xi_b(\theta, t) &= (1 - \xi_p)(1 - e^{-b(\theta)t^{n(\theta)}})\end{aligned}\quad (2)$$

onde $b(\theta)$ e $n(\theta)$ são as constantes cinéticas dadas por

$$n(\theta) = \frac{\ln\left(\frac{\ln(1 - \eta_f)}{\ln(1 - \eta_s)}\right)}{\ln\left(\frac{t_s}{t_f}\right)}\quad (3)$$

e

$$b(\theta) = \frac{-\ln(1 - \eta_s)}{(t_s)^{n(\theta)}}\quad (4)$$

com $\eta_s = 0,01$, $\eta_f = 0,99$, e $t_s = t_s(\theta)$ e $t_f = t_f(\theta)$, 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 Marburger¹⁰

$$\xi_M(\theta) = (1 - \xi_p - \xi_b)(1 - e^{-0,011(M_s - \theta)}) \quad , \quad \theta < M_s\quad (5)$$

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 $\xi_a = 1 - \xi_p - \xi_b - \xi_m$.

3 CÁLCULO DOS PARÂMETROS CINÉTICOS EM FUNÇÃO DA TAXA DE TEMPERATURA

Alguns autores¹²⁻¹³ utilizaram diagramas de resfriamento contínuo para estimar a mudança de volume devido à transformação de fase para o cálculo de tensões internas, porém com resultados da predição da cinética de transformação de fase não satisfatórios¹¹.

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, $b = b(\theta, \dot{\theta})$ e $n = n(\theta, \dot{\theta})$.

No esquema abordado por alguns autores³⁻¹¹, 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, é o gráfico da função

$$\xi(\theta, t) = (1 - e^{-b(\theta)t^{n(\theta)}})\quad (6)$$

e está representada na figura 1 abaixo, onde os valores no eixo x são referentes a $\log_{10}(t)$.

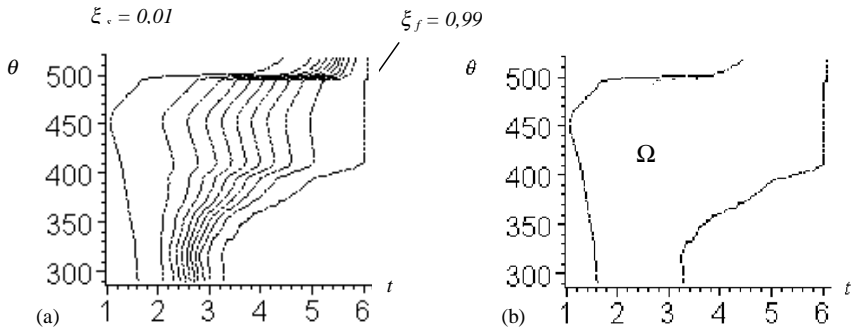


Figura 1: (a) representação das curvas de superfície de fração de bainita transformada e (b) região de transformação

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 (t, θ) passa a estar contido na região de transformação Ω definida pelo diagrama de resfriamento isotérmico, ou seja, a região compreendida entre as curvas de nível $\xi_b = 0,01$ e $\xi_b = 0,09$ e a reta $\theta = M_s$, onde M_s é a temperatura de início da transformação martensítica (figura 1b acima). O tempo de término da transformação é estimado efetuando-se uma busca em linha do ponto de máximo da função (6) na direção da derivada da temperatura em relação ao tempo, ou seja,

$$\max_{\alpha} \xi(\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d})$$

onde $\mathbf{x} + \alpha \mathbf{d} \in \Omega$, $\mathbf{x} = (t, \theta)$ e \mathbf{d} é o vetor na direção de $\dot{\theta}$

São possíveis 2 situações para o ponto de máximo P_{max} de coordenadas (t_p, θ_p) encontrado:

- (i) o ponto P_{max} está sobre a curva de nível $\xi_b = 0,09$: neste caso tem-se $\eta_f \leftarrow 0,99$
- (ii) o ponto P_{max} está sobre a reta $\theta = M_s$ ou está contido no interior da região de transformação: neste caso tem-se $\eta_f \leftarrow \xi(t_p, \theta_p)$

A figura abaixo representa graficamente a situação (ii) acima descrita, ilustrando a diferença de valores obtidos para t_s e t_f nos dois esquemas apresentados. Neste exemplo considera-se P_{max} sobre a reta $\theta = M_s$.

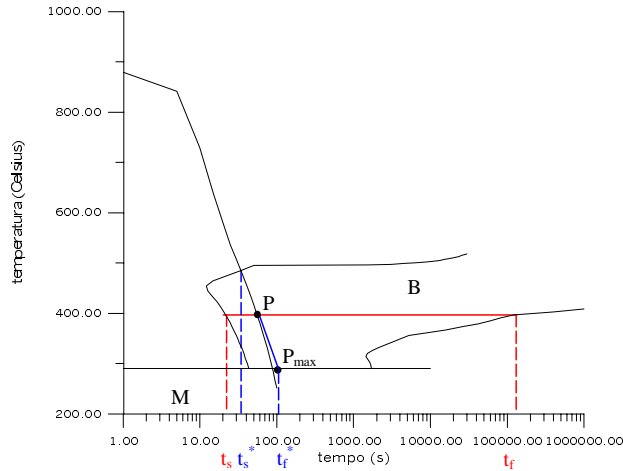


Figura 2: comparação entre os valores de t_s e t_f calculados pelos diferentes esquemas

4 EXEMPLOS NUMÉRICOS

Para estudar a influência da taxa de resfriamento sobre os resultados obtidos no cálculo das frações transformadas foram efetuadas duas simulações numéricas de tratamento térmico de um cilindro de aço AISI 4340, de 75mm de diâmetro e 180mm de comprimento, resfriado por jato de água de alta pressão. Por falta de dados confiáveis, optou-se pela utilização das características termo-mecânicas do aço 3.25Ni-1Cr¹¹, juntamente com as curvas de resfriamento istoérmico do aço AISI 4340¹⁵. Por ser um aço ao carbono, a peça está sujeita a transformações difusionais. A malha de elementos finitos utilizada neste exemplo é composta por 200 elementos axissimétricos Q8 e 661 nós. Não foi considerada a geração de calor pela transformação de fase para que fosse estudada apenas a variação da fração transformada de bainita.

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

A figura 3 apresenta a evolução da temperatura no ponto central do cilindro para diferentes taxas de resfriamento.

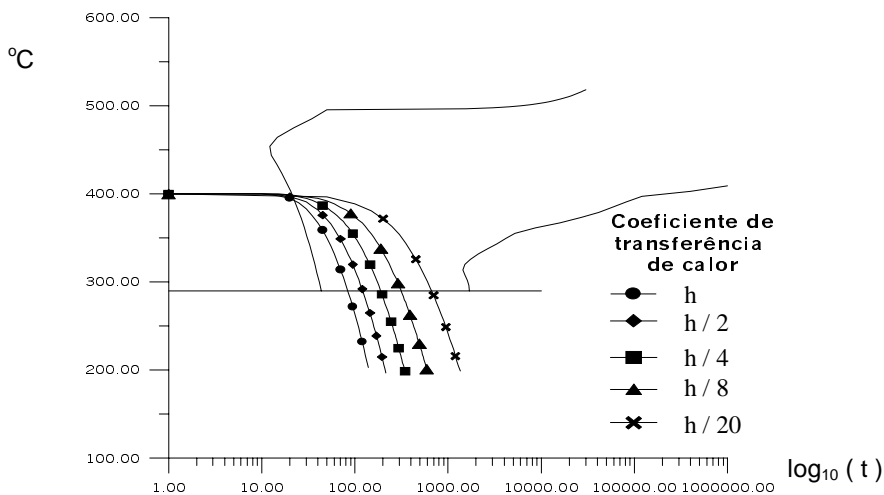
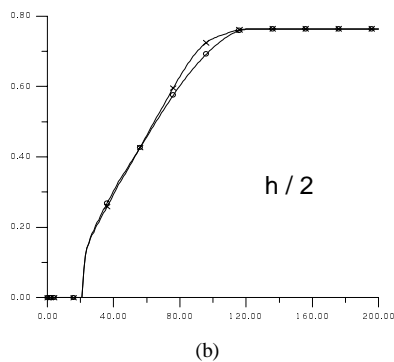
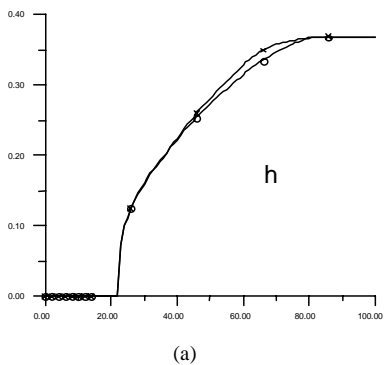


Figura 3: evolução da temperatura no ponto central da peça, para diversos valores de h

Os gráficos da figura 4 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.



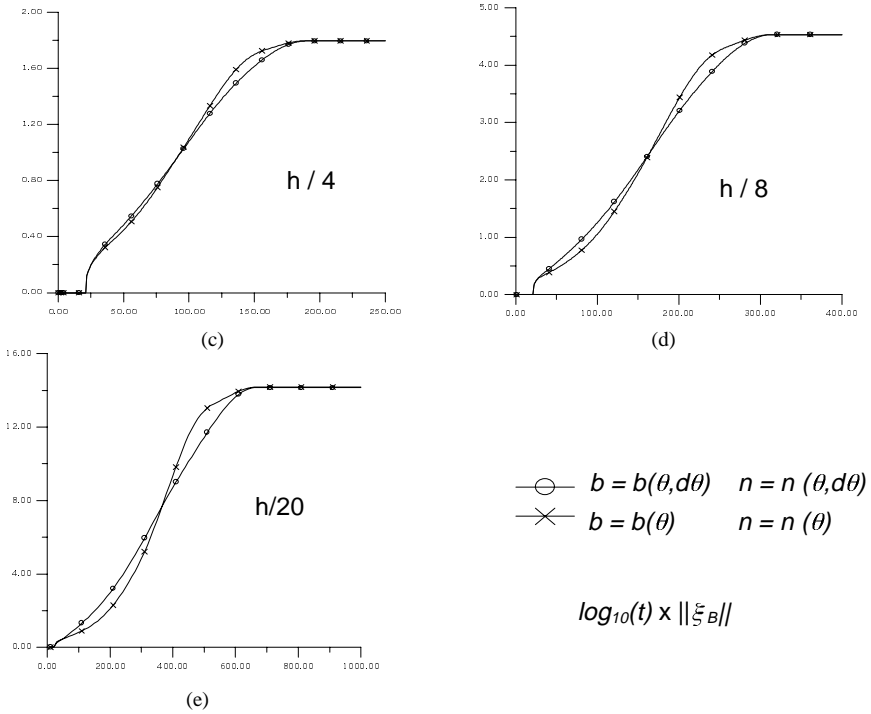


Figura 4: comparação entre os esquemas para o cálculo das frações transformadas (módulo do vetor de fração parcial de bainita ao longo do tempo).

Na segunda análise foi considerada a t mpera do mesmo cilindro da simula o anterior, por m com temperatura inicial de 880 C, para dois valores do coeficiente de transfer ncia de calor, gerando ent o distribui es de temperatura com gradientes t rmicos diferentes.

A figura 5 apresenta a evolu o da temperatura no ponto central do cilindro e a figura 6 a compara o entre os esquemas de c lculo das fra es parciais transformadas, atrav s do gr fico do m dulo da fra o parcial de bainita em rela o ao tempo.

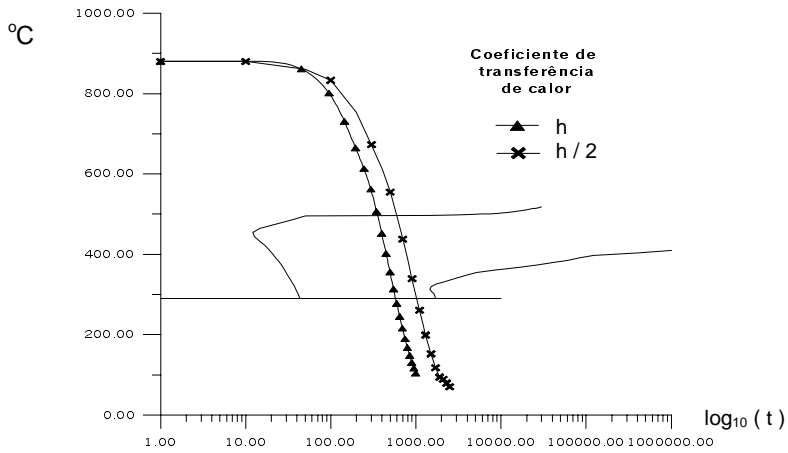


Figura 5: evolução da temperatura no ponto central da peça durante a têmpera, para dois valores de h

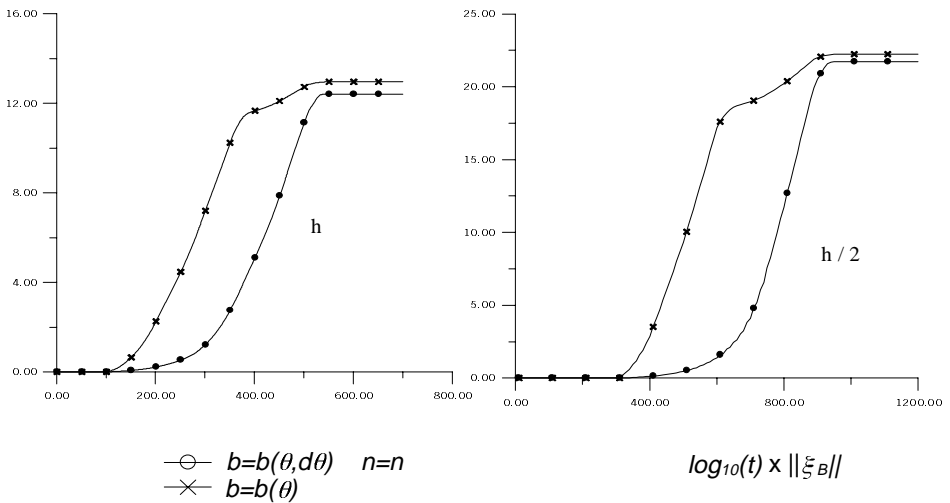


Figura 6: comparação entre os esquemas para o cálculo das frações transformadas (módulo do vetor de fração parcial de bainita ao longo do tempo).

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 tradicional, 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 neste trabalho, acredita-se que a inclusão da taxa de resfriamento nesses cálculos represente melhor o fenômeno do que o método anteriormente utilizado.

5 CONCLUSÕES

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. Sendo assim, sua implementação em programas que simulam processos de tratamento térmico em peças de aço carbono é recomendada, principalmente em processos de têmpera interrompida.

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

Em etapas posteriores deste trabalho de pesquisa será estudada a influência dos novos valores para a fração transformada encontrados através do esquema numérico hora proposto sobre as tensões residuais geradas em peças de aço quando submetidas a tratamentos térmicos.

6 REFERÊNCIAS

- [1] J. H. Argyris, J. Szimmat and K. J. Willam, "Finite Element Analysis of arc-welding processes", *Numerical Methods in heat transfer*, **111**, 1-34 (1985).
- [2] M. Avrami, "Kinetics of phase change", *Journal of Chemical. Physics*, I 1939, **7**, 1103, II 1940, **8**, 212, III 1941, **9**, 171
- [3] A. Bokota and S. Iskierka, "Numerical Analysis of phase transformations and residual stresses in steel cone-shaped elements hardened by induction and flame methods", *Int. J. Mech. Sci.*, **40**, 617-629 (1998).
- [4] S. Denis, E. Gautier, A. Simon and G. Beck, "Stress-phase-transformations – basic principles, modeling and calculation of internal stresses", *Materials Science and Technology*, **1**, 805-814 (1985).
- [5] Y. Fa-Rong, W. Shang-Li, "Transient-temperature and residual-stress fields in

- axisymmetric metal components after hardening”, *Materials Science and Technology*, **1**, 851-856 (1985)
- [6] E. B. Hawbolt, B. Chau and J. K. Brimacombe, *Metallurgical Transactions A*, **14A**, 1803-1815 (1983)
- [7] T. J. R. Hughes, *The Finite Element Method: linear static and dynamic finite element analysis*. Prentice-Hall International Editions (1987).
- [8] T. J. R. Hughes “Unconditionally Stable Algorithms for Nonlinear Heat Conduction”. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, **10**, 135-139 (1977).
- [9] T. Inoue, S. Nagaki, T. KISHIMO, M. MONKAWA, “Coupling between stress, temperature and metallic structures during processes involving phase transformations” *Materials Science and Technology*, **1**, 845-850 (1985).
- [10] D. P. Koistiner, R. E. Marburger, “A general equation prescribing the extent of austenite-martensite transformation in pure iron-carbon alloys and plain carbon steels”, *Acta Metallurgica*, **7**, pp 59 (1959).
- [11] Y. Nagasaka, J. K. Brimacombe, E. B. Hawbolt, I. V. Samarasekera, B. Hernandez-Morales and S. E. Chidiac, “Mathematical model of phase transformations and elasto-plastic stress in water spray quenching of steel bars”, *Metallurgical Transactions A*, **24A**, 795-808 (1993)
- [12] T. Inoue, Z. Wang, *Material Sci. Technol.*, **1** (10), 845-850 (1985).
- [13] H. Fujio, T. Aida, U. Matsumoto, *Bull. JSME*, **20**, 218-223, 1972
- [14] A. F. Camarão, “Um modelo para previsão de tensões residuais em cilindros de aço temperados por indução”, Tese de doutorado, Universidade de São Paulo (1998).
- [15] W. C. Leslie, *The Physical Metallurgy of steel*, Tech Books.
- [16] D. G. Luenberger, *Introduction to Linear and Nonlinear Programming*, Addison-Wesley (1973)