

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Curso de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e de Minas

Tese de Doutorado

**MODELAMENTO DA TRANSFORMAÇÃO DE
FASES DE AÇOS DE ALTA RESISTÊNCIA
MICROLIGADOS AO Nb DURANTE
RESFRIAMENTO APÓS LAMINAÇÃO EM
TIRAS A QUENTE**

Autor: Antônio Adel dos Santos

Orientador: Prof. Ronaldo A. N. M. Barbosa

Outubro/2007

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Curso de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica e de Minas

Antônio Adel dos Santos

**MODELAMENTO DA TRANSFORMAÇÃO DE FASES DE AÇOS
DE ALTA RESISTÊNCIA MICROLIGADOS AO Nb DURANTE
RESFRIAMENTO APÓS LAMINAÇÃO EM TIRAS A QUENTE**

Tese de Doutorado Apresentada ao Curso de Pós-Graduação em
Engenharia Metalúrgica e de Minas da Universidade Federal de Minas
Gerais

Área de concentração: Metalurgia da Transformação

Orientador: Prof. Ronaldo A. N. M. Barbosa

Belo Horizonte

Escola de Engenharia da UFMG

Outubro, 2007

Dedico esta tese primeiramente a Deus, pois tudo posso naquele que me fortalece; a meus pais, Antônio e Vitória, por legarem-me a crença, determinação e firmeza nos propósitos, e à minha esposa Myla e filhas Loren e Maria Clara, alegria maior de minha vida.

AGRADECIMENTOS

Sou muito grato, primeiramente, à Usiminas por conceder-me a oportunidade de realizar este trabalho de obtenção do título de doutorado.

Em especial quero agradecer ao Prof. Ronaldo Barbosa pela orientação e oportunas sugestões na elaboração da tese.

Agradeço ao Superintendente do Centro de Pesquisa e Desenvolvimento, Eng.º Eduardo Avelar Tonelli, e ao Gerente de Pesquisa e Desenvolvimento de Processos, Eng.º Ricardo Miranda Alé, pelo incentivo e apoio imprescindíveis para a realização deste trabalho.

Ao colega de trabalho, Eng.º Túlio Magno Füzessy de Melo, pelas discussões e fundamental contribuição a este trabalho, especialmente nos ensaios na Gleeble e análises da microestrutura.

Ao colega de trabalho Eng.º Bruno Alves Resende, pelo desenvolvimento da rede neural artificial utilizada no modelamento da cinética de transformação.

Ao técnico Adirceu de Melo Pereira, colaborador incansável e solícito em todas as atividades laboratoriais realizadas nesta tese.

RESUMO

Apesar da extraordinária dimensão dos equipamentos utilizados, as especificações de forma, dimensões e propriedades mecânicas são muito restritas na indústria siderúrgica de laminados planos. Uma ferramenta muito útil na obtenção e controle de tais especificações é o modelamento matemático de processos, usado para simulação *off line*, ou para controle *on line* do processo. Na laminação de tiras a quente, após a saída da última cadeira do trem acabador, a tira passa por uma mesa de resfriamento a altas taxas, sendo bobinada posteriormente, quando o resfriamento torna-se muito lento. Durante este percurso ocorre a decomposição da austenita, fenômeno de grande importância tanto para as propriedades mecânicas finais e que, por ser exotérmica, influencia o resfriamento da tira, e, portanto, o acerto da temperatura de bobinamento. Encontram-se na literatura alguns modelos para prever essa transformação, porém são para aços específicos, normalmente CMn, e nenhum deles considera o fato da taxa de resfriamento ser alterada durante o percurso da transformação. Portanto, neste trabalho foram desenvolvidas formulações matemáticas, baseadas em resultados de ensaios laboratoriais no simulador Gleeble 3500, para previsão da transformação da austenita de um aço CMn microligado ao Nb-V-Ti, produzido industrialmente na Linha de Tiras a Quente da Usiminas para atender à qualidade API-5L-X70. Foi considerada a condição de resfriamento em duas taxas: uma alta até o bobinamento, e outra lenta posteriormente. Foi estudado o efeito sobre a transformação das variáveis: deformações do material em temperaturas acima e abaixo da temperatura de não-recristalização, taxa de resfriamento rápido e temperatura de bobinamento. Foram desenvolvidos modelos para prever: (i) a temperatura de início de transformação, através de uma equação empírica; (ii) a cinética de transformação, conjugando-se a equação de Avrami com a regra da aditividade; (iii) as frações volumétricas dos constituintes ferrita e perlita, através de um procedimento em que o início de formação da perlita ocorre quando o teor de C da austenita enriquecida intercepta a linha A_{cm} , calculada em condições de paraequilíbrio, e extrapolada abaixo de Ae_1 . A equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade mostrou-se adequada para prever a decomposição da austenita mesmo com mudança da taxa de resfriamento, o que indica a aplicabilidade do método quando o perfil de resfriamento for variável. A aplicação do modelo integrado para as condições de processamento industrial do aço estudado permitiu prever com satisfatória aproximação a microestrutura e a dureza obtidas em amostra da bobina laminada. Mostrou-se, também, que é fundamental no modelo se levar em conta os dois regimes de resfriamento, antes e após o bobinamento, pois a decomposição da austenita não se completa até o bobinamento em aços microligados, ao contrário do que ocorre com os aços CMn comuns.

Palavras-chave: aços microligados de alta resistência, transformação de fase, modelo matemático, laminação a quente.

ABSTRACT

Although equipments used in the steel industry are very large, specifications of shape, dimensions and mechanical properties of flat hot rolled products are very strict. An useful tool to help meet such specifications is the mathematical modelling of process, which can be used for either off line simulation or on line control. In hot strip rolling, the steel strip, after leaving the last rolling stand, is subjected first to a fast cooling on the run-out table and then to a slow cooling after coiling. During the cooling period, austenite decomposition takes place, this phenomenon playing an important role in the final mechanical properties as well as in the coiling temperature control, as this reaction is exothermic. Models for predicting the austenite transformation can be found in the literature, but they are usually limited to specific chemical compositions, often CMn steels, and none of such models takes into account the fact that the cooling rate is changed during the course of transformation. Thus, in this work, an integrated mathematical model for predicting the phase transformation of a commercial CMn steel microalloyed with Nb,V,Ti to meet the API-5L-X65 grade, has been developed. Intensive laboratory experiments using a Gleeble 3500 thermomechanical simulator were carried out to raise a database for the model development. The following variables influencing transformation were investigated: strain above and below the non-recrystallization temperature; cooling rate down to coiling, and coiling temperature. The integrated model has the following submodels: (i) a model to predict the transformation start temperature, based on empirical formulae; (ii) a transformation kinetics model formulated by the Avrami equation conjugated with the additivity rule; (iii) prediction of volumetric phase fractions of ferrite and pearlite by using a mathematical procedure, in which pearlite formation starts when the carbon content of enriched austenite reaches the extrapolated A_{cm} line under paraequilibrium conditions. The Avrami equation together with the additivity rule was able to describe the transformation even when two distinct cooling regimes were employed. This implies that the model can be applied to any cooling profile in industrial process. Besides, the application of the integrated model to processing conditions of the investigated steel has led to satisfactory predictions of microstructure and hardness observed in the coil. It has also been shown that the two cooling regimes must be considered in the model in order to predict the transformation properly, since the transformation of microalloyed steels advances over the coiling process, different for the case of CMn steels.

Key words: phase transformation; high strength microalloyed steels, mathematical modelling, hot strip rolling.

ÍNDICE

	Página
AGRADECIMENTOS.....	I
LISTA DE FIGURAS.....	IX
LISTA DE TABELAS.....	XV
LISTA DE SÍMBOLOS.....	XVII
1. INTRODUÇÃO.....	1
2. OBJETIVOS.....	5
3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
3.1. Conceitos Fundamentais sobre a Transformação da Austenita nos Aços.....	6
3.1.1. A transformação no contexto do diagrama Fe-C.....	6
3.1.2. Transformação difusional e transformação adifusional.....	8
3.1.3. Microestruturas obtidas após transformação da austenita.....	11
3.1.3.1. Ferrita poligonal (FP).....	12
3.1.3.2. Ferrita de Widmanstätten (FW).....	12
3.1.3.3. Ferrita quasi-poligonal ou ferrita massiva (FQ).....	13
3.1.3.4. Ferrita acicular ou ferrita bainítica (FA ou FB).....	14
3.1.3.5. Ferrita granular ou ferrita bainítica granular (FG).....	15
3.2. Termodinâmica da Transformação.....	15
3.2.1. Modelos termodinâmicos.....	17
3.2.2. Condições de equilíbrio na interface durante a transformação.....	19
3.3 Cinética da Transformação Isotérmica.....	20
3.3.1. Diagramas TTT.....	21
3.3.2. Cinética de nucleação.....	23
3.3.3. Cinética de crescimento.....	25
3.3.4. Equação do tipo Avrami.....	28
3.4 Transformação em Resfriamento Contínuo.....	32
3.4.1. Diagramas CCT.....	32
3.4.2. Seqüência de formação das fases.....	33
3.5 Transformação em Resfriamento Contínuo de Aços de Alta Resistência Microligados ao Nb.....	34
3.5.1. Efeito da composição química.....	35
3.5.2. Efeito da microestrutura da austenita prévia.....	39
3.5.3. Efeito das condições de resfriamento.....	45

3.5.4. Efeito da adição de Nb	47
3.6 Métodos Experimentais de Estudo da Transformação da Austenita	50
3.6.1. Método metalográfico	50
3.6.2. Dilatometria	50
3.6.3. Análise térmica diferencial	51
3.6.4. Medidas de relaxação de tensões	51
3.6.5. Método calorimétrico	52
3.6.6. Medidas magnéticas	52
3.7 Estudo da Transformação Baseando-se em Curvas Dilatométricas	52
3.7.1. Temperaturas de transformação	52
3.7.2. Determinação da fração transformada pela regra da alavanca	54
3.8 Modelamento Matemático da Transformação da Austenita	58
3.8.1. Regra da aditividade	58
3.8.1.1 Fundamentação teórica e prática para validade da regra da aditividade	59
3.8.2. Modelamento via equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade	63
3.8.3. Formulação da transformação através de equações de migração de interface	68
3.8.4. Formulação de Suehiro	70
3.8.5. Formulações desenvolvidas por Kirkaldy	75
3.8.6. Outras formulações encontradas na literatura	77
3.9 Modelamento do Tamanho de Grão Ferrítico	79
3.10 Procedimentos Experimentais Utilizados na Literatura para Estudo da Transformação da Austenita em Resfriamento Contínuo	87
3.11 Resumo	99
4. CÁLCULOS TERMODINÂMICOS	100
4.1. Cálculo da Temperatura A_{e3}	100
4.2. Cálculo das Linhas de Equilíbrio $\alpha/\alpha+\gamma$ e $\alpha+\gamma/\gamma$	105
4.3. Cálculo da Linha de Equilíbrio γ /cementita, Linha A_{cm}	106
4.3.1 Base de dados de Kirkaldy	107
4.3.2 Base de dados de Miettinen	107
4.4. Rotinas em Fortran	109
4.5. Resumo	110
5. METODOLOGIA EXPERIMENTAL	111
5.1. Materiais Usados	111
5.2. Preparação dos Corpos-de-Prova para os Ensaios	112
5.3. Ensaio para Avaliação da Microestrutura após Encharque	113
5.4. Ensaio para Avaliação do Grão Recristalizado após Deformação a 1080°C	114

5.5. Ensaio para Avaliação da Microestrutura após Deformação a 880°C.....	115
5.6. Ensaio para Estudo da Transformação	116
5.7. Ensaio para Caracterização da Microestrutura Durante a Transformação.....	119
5.8. Caracterização dos Corpos-de-prova após Ensaio Dilatométrico	119
5.8.1 Análise da microestrutura.....	120
5.8.2 Análise da dureza	121
5.9. Revenimento de Corpos-de-prova após Ensaio Dilatométrico	121
5.10. Caracterização da Microestrutura de Amostra da Bobina Industrial	122
5.10 Resumo.....	122
6. EVOLUÇÃO DA MICROESTRUTURA AUSTENÍTICA ANTES DA TRANSFORMAÇÃO	123
6.1. Grão Austenítico após Encharque.....	123
6.2. Estrutura Austenítica após Deformação a 1080°C.....	127
6.3. Microestrutura após Deformação a 880°C.....	128
6.4 Resumo.....	128
7. RESULTADOS DOS ENSAIOS DILATOMÉTRICOS	130
7.1. Aspecto dos Corpos-de-prova Ensaçados.....	130
7.2. Exemplos de Curvas Obtidas	131
7.3. Parâmetros das Curvas Dilatométricas.....	134
7.4. Resumo.....	141
8. TEMPERATURA DE INÍCIO DE TRANSFORMAÇÃO	142
8.1. Método de Determinação de Ar ₃ na Curva Dilatométrica	142
8.2. Verificação da Microestrutura no Início da Transformação	143
8.3. Influência de Parâmetros de Processo na Ar ₃	145
8.3.1. Efeito da taxa de resfriamento	145
8.3.2. Efeito da deformação abaixo de T _{nr}	150
8.3.3. Efeito da deformação acima de T _{nr}	152
8.3.4. Influência do teor de Nb e do processo do aço, industrial ou piloto, em Ar ₃	154
8.4. Modelo de Previsão da Ar ₃	157
8.5. Previsão da Ar ₃ Para os Aços Fabricados em Escala Piloto.....	163

8.6. Resumo.....	166
9. MICROESTRUTURAS FORMADAS.....	167
9.1. Efeito da Deformação ε_1	168
9.2. Efeito da Deformação ε_2	170
9.3. Efeito da Taxa de Resfriamento	172
9.4. Efeito da Temperatura de Bobinamento.....	174
9.5. Efeito da Rota de Processamento e do Teor de Nb do Aço	178
9.6. Resumo.....	180
10. CINÉTICA DE TRANSFORMAÇÃO.....	181
10.1. Determinação das Curvas de Transformação.....	181
10.2. Efeito das Variáveis de Processo na Cinética de Transformação	184
10.2.1. Efeito da deformação acima de T_{nr}	184
10.2.2. Efeito da deformação abaixo de T_{nr}	186
10.2.3. Efeito da taxa de resfriamento	191
10.2.4. Efeito da temperatura de bobinamento.....	195
10.2.5. Efeito do teor de Nb e da rota de processamento do aço na transformação	199
10.3. Modelamento da Cinética de Transformação.....	202
10.3.1. Modelo da cinética de transformação pela equação de Avrami	205
10.3.2. Análise dos parâmetros do modelo da cinética.....	210
10.3.2.1. Relação entre os parâmetros do modelo	210
10.3.2.2. Interpretação dos parâmetros do modelo	213
10.3.3. Efeito das variáveis de processo nos parâmetros do modelo.....	222
10.3.4. Previsão do parâmetro B do modelo da cinética de transformação.....	225
10.4. Previsão dos Constituintes Formados	230
10.4.1. Constituintes formados.....	230
10.4.2. Modelo de previsão da fração de ferrita total e de segunda fase	234
10.5. Resumo.....	242
11. APLICAÇÃO DO MODELO AO PROCESSO INDUSTRIAL	243
11.1. Análises de Dureza.....	244
11.2. Efeito de Revenir os Corpos-de-prova na sua Microestrutura	250
11.3. Aplicação do Modelo às Condições de Processo Industrial.....	252
11.3.1. Evolução da microestrutura até o início da transformação.....	252
11.3.2. Aplicação do modelo de transformação desenvolvido	257
11.4. Comparação entre a Microestrutura Industrial e as Obtidas nos Ensaios	260

11.5. Previsão do Tamanho de Grão Ferrítico	263
11.6. Resumo.....	265
12. CONCLUSÕES	266
13. CONTRIBUIÇÕES ORIGINAIS E RELEVÂNCIA DOS RESULTADOS.....	270
14. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	271
15. PUBLICAÇÕES RELACIONADAS COM O TRABALHO.....	272
16. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	273
17. ANEXO.....	294
17.1. Rotina de Cálculos Termodinâmicos de Acordo com Kirkaldy.....	294
17.2. Rotina de Cálculos Termodinâmicos de Acordo com Miettinen	316
17.3. Rotina de Obtenção dos Parâmetros A e B de Ajuste do Modelo.....	333

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 3.1 - Diagrama de equilíbrio Fe-C destacando a região de transformação da austenita, para um sistema binário Fe-C, em (a), e para uma liga Fe-C-M, em (b), onde M representa soluto substitucional ¹⁸ .	6
Figura 3.2 - Diagrama esquemático de energia livre de Gibbs ⁶ das fases austenita e ferrita.	7
Figura 3.3 - Diagrama esquemático da região hipoeutetóide do diagrama de equilíbrio Fe-C, mostrando os perfis de concentração de C à frente da interface de transformação em duas temperaturas ²⁷ .	10
Figura 3.4 - Exemplo de microestrutura constituída de ferrita poligonal em aço HSLA 80, transformado isotermicamente a 675°C por 500 s. As áreas escuras são martensita formada durante têmpera da amostra ³⁶ .	12
Figura 3.5 - Ferrita de Widmanstätten (grãos grandes brancos alongados) formados no aço HSLA 80, transformado isotermicamente a 600°C por 100 s. As regiões escuras são martensita formada durante resfriamento rápido ³⁶ .	13
Figura 3.6 - Ferrita quasi-poligonal formada em um aço ultrabaixo C contendo 3% de Mn, resfriado a 50°C/s ³⁶ .	14
Figura 3.7 - Ferrita bainítica formada em um aço baixo C microligado ao Nb e Ti, resfriado a 5°C/s a partir da austenita não deformada com tamanho de grão de 200 μm ⁴⁰ .	14
Figura 3.8 - Ferrita granular formada em resfriamento contínuo a 1°C/s de um aço baixo C com adições de Mn-Cu-Ni-Cr-Mo ³⁶ .	15
Figura 3.9 - Curvas de energia livre de Gibbs para as fases α e γ no sistema Fe-C ⁴⁵ .	16
Figura 3.10 - Representação esquemática da distribuição de elementos de liga entre a austenita e a ferrita para os três modos de equilíbrio ⁶⁶ , A: ortoequilíbrio; B: equilíbrio local; C: paraequilíbrio.	20
Figura 3.11 - Diagrama TTT para o aço AISI4130 contendo 0,30%C-0,64%Mn-1,0%Cr-0,24%Mo, de acordo com o <i>ASM Handbook</i> ⁶⁷ .	21
Figura 3.12 - Diagrama TTT de um aço 0,69%C-0,44%MN-0,24%Si-0,45%Cr-0,8%Ni-0,12%Mo medido em (a), e limites superior e inferior de transformação em (b), estabelecidos por Fang et al. ⁷² .	23
Figura 3.13 - Geometria de núcleo coerente tipo <i>pill box</i> , proposto por Lange et al. ⁷⁶ .	24
Figura 3.14 - Velocidade de crescimento da bainita a partir da decomposição isotérmica da austenita, de acordo com as formulações de Kaufman et al. ³¹ , para ligas Fe-C com diferentes teores de C.	27
Figura 3.15 - Diagrama CCT para o aço AISI4130 contendo 0,30%C-0,64%Mn-1,0%Cr-0,24%Mo, de acordo com o <i>ASM Handbook</i> ⁶⁷ .	33
Figura 3.16 - Esquema de modelamento global da decomposição para formação seqüencial das fases ferrita, perlita e bainita ⁹⁴ .	34

Figura 3.17 - Efeitos do tamanho de grão inicial $d\gamma$, (a), e da deformação aplicada ϵ , (b), na cinética de transformação da austenita em resfriamento contínuo ¹¹²	42
Figura 3.18 - Diagramas CCT de um aço baixo carbono microligado ao Nb e Ti, obtidos a partir da austenita recristalizada, em (a), e deformada, em (b), mostrando a ampliação do campo da ferrita poligonal com a deformação ³⁸	43
Figura 3.19 - Tamanho de grão ferrítico médio (símbolos cheios) e fração volumétrica de ferrita (símbolos vazios) em função do tamanho de grão austenítico inicial, para a austenita deformada e não deformada ¹¹¹	44
Figura 3.20 - Influência da deformação acumulada, ϵ_c , no tamanho de grão ferrítico para diferentes tamanhos de grão austenítico inicial ¹¹¹	45
Figura 3.21 - Efeito da taxa de resfriamento na temperatura A_{r3} , para diferentes condições de deformação da austenita em um aço C-Mn-Si-Nb-Ti-Mo ¹⁰⁸	46
Figura 3.22 - Influência da deformação acumulada no tamanho de grão ferrítico, em diferentes taxas de resfriamento, sendo o tamanho de grão austenítico da ordem de $40 \mu\text{m}$ ¹¹¹	46
Figura 3.23 - Comparação entre curvas TTT calculadas (linhas contínuas) e experimentais (círculos), de aços C-Mn (a), e de aços C-Mn-Nb, (b), mostrando o atraso no início de transformação da austenita ¹¹⁸	49
Figura 3.24 - Diagrama mostrando a evolução do teor de C na austenita durante a transformação para um ensaio com o aço 0,10%C-0,81%Mn, encharcado a 1100°C e resfriado a 10°C/s a partir de 900°C ¹⁷	53
Figura 3.25 - Método da regra da alavanca para cálculo da fração transformada da austenita, XA, a partir da curva dilatométrica	55
Figura 3.26 - Comparação entre curvas, calculadas por diferentes métodos, da cinética de transformação global da austenita em ferrita e perlita em um aço 0,10%C-0,40%Mn, resfriado a 10°C/s após encharque a 900°C por 2 min.	56
Figura 3.27 - Exemplo de cálculo da evolução das frações formadas de ferrita, perlita e bainita em um aço de médio C, microligado ao Nb e Ti, resfriado a 6°C/s após encharque a 1200°C . Cálculos segundo a metodologia proposta por Zhao et al. ^(20,135)	57
Figura 3.28 - Representação esquemática do princípio da aditividade ¹⁴³	60
Figura 3.29 - Fotomicrografia do aço 1010 parcialmente transformado a 812°C por 15 s e resfriado em água, mostrando a ferrita proeutetóide nucleando nos contornos de grão da austenita ²⁷	62
Figura 3.30 - Curvas experimentais de transformação obtidas em condições isotérmicas e em duas temperaturas diferentes para o aço 1010 ²⁷ . Em (a), a transformação começa em T_2 e termina em T_1 , e em (b), começa em T_1 e termina em T_2 . Em ambos os casos, T_2 é menor que T_1	63
Figura 5.1 - Ensaio para determinação do tamanho de grão recristalizado após deformação.	114
Figura 5.2 - Ensaio para avaliação da estrutura austenítica após deformação a 880°C	115
Figura 5.3 - Esquema dos ensaios dilatométricos na Gleeble, na condição com bobinamento.	116
Figura 5.4 - Fotografia mostrando a execução do ensaio durante encharque do corpo-de-prova	117
Figura 5.5 - Esquema dos ensaios dilatométricos na Gleeble, na condição sem bobinamento.	118
Figura 6.1 - Estrutura austenítica dos aços após encharque em variadas condições. Mesma ampliação em todas as fotomicrografias.	124

Figura 6.2 - Tamanho de grão austenítico em função da temperatura de encharque.	126
Figura 6.3 - Estrutura austenítica após deformação do aço I-47Nb a 1080°C.	127
Figura 6.4 - Estrutura austenítica após deformação a 880°C.	128
Figura 7.1 - Fotografia do corpo-de-prova original (primeiro à esquerda) e de corpos-de-prova após ensaios com deformações $\varepsilon_1 = 0,25$, e $\varepsilon_2 = 0; 0,22; 0,36$, nesta ordem, da esquerda para direita.	130
Figura 7.2 - Curvas obtidas para o ensaio com o aço I-47Nb, com $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$	132
Figura 7.3 - Curvas obtidas para o ensaio com o aço I-47Nb, com $\varepsilon_1=0,25$ e $\varepsilon_2=0,22$, resfriado diretamente a 5°C/s até a temperatura ambiente.	133
Figura 8.1 - Fotomicrografia das microestruturas logo após o início de transformação, ataque nital 4%. As regiões brancas são ferrita proeutetóide nos contornos dos grãos austeníticos.	144
Figura 8.2 - Efeito da taxa de resfriamento na A_{r3} no aço I-47Nb, com deformações $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$	146
Figura 8.3 - Efeito da taxa de resfriamento em A_{r3} média para o aço I-47Nb, na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$	147
Figura 8.4 - Gráfico bilogarítmico do efeito de TR em A_{r3} no aço I-47Nb, na condição de ensaio $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$	148
Figura 8.5 - Efeito da taxa de resfriamento em A_{r3} média para o aço I-47Nb, em três níveis de deformação da austenita na região de não-recristalização.	149
Figura 8.6 - Gráfico bilogarítmico do efeito de TR em A_{r3} do aço I-47Nb, nos três níveis de deformação abaixo da temperatura de não recristalização.	150
Figura 8.7 - Efeito da deformação ε_2 em A_{r3} no aço I-47Nb, na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e TR = 5°C/s.	151
Figura 8.8 - Gráfico bilogarítmico mostrando o efeito de ε_2 em A_{r3}	152
Figura 8.9 - Efeito da deformação acima de T_{nr} em A_{r3} do aço I-47Nb na condição base de ensaio, TR = 5°C/s e $\varepsilon_2 = 0,25$, em (a); gráfico bilogarítmico entre A_{r3} e ε_1 , em (b).	154
Figura 8.10 - Efeito do Nb e da rota de produção na temperatura de início de transformação, para ensaios na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$	155
Figura 8.11 - Efeito do Nb e da rota de produção na temperatura de início de transformação para ensaios na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,36$	156
Figura 8.12 - Gráfico comparativo entre valores medidos e calculados de A_{r3} com a equação desenvolvida.	161
Figura 8.13 - Comparação entre valores calculados de A_{r3} pela equação desenvolvida e pela equação de Ouchi, para condições típicas de laminação de chapas grossas.	162
Figura 8.14 - Comparações entre A_{r3} calculadas e medidas para os aços processados em escala piloto.	165
Figura 9.1 - Microestrutura obtida após ensaio do aço I-47Nb, na condição base com $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$	168
Figura 9.2 - Efeito da deformação ε_1 na microestrutura formada com e sem bobinamento. Aço I-47Nb, $\varepsilon_2=0,22$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$	169

Figura 9.3 - Efeito da deformação ε_2 na microestrutura formada com bobinamento. Aço I-47Nb, $\varepsilon_1=0,25$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$.	171
Figura 9.4 - Efeito da taxa de resfriamento na microestrutura formada. Aço I-47Nb, $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e $T_b = 600^\circ\text{C}$.	173
Figura 9.5 - Efeito da temperatura de bobinamento na microestrutura do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e TR = 5°C/s.	175
Figura 9.6 - Efeito da temperatura de bobinamento na microestrutura formada do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,36$ e TR = 10°C/s.	177
Figura 9.7 - Comparação entre as microestruturas formadas em corpos-de-prova ensaiados com $\varepsilon_1=0,25$, TR=10°C/s, $T_b=600^\circ\text{C}$, e deformação $\varepsilon_2=0,22$ (à esquerda) e $\varepsilon_2=0,36$ (à direita).	179
Figura 10.1 – Exemplos de curvas relativas aos resultados de ensaios e à cinética de transformação do aço I-47Nb resfriado a 5°C/s com bobinamento em (a), e sem bobinamento em (b).	183
Figura 10.2 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para diferentes níveis de deformação acima de T_{nr} , na condição $\varepsilon_2 = 0,22$, TR = 5°C/s $T_b = 600^\circ\text{C}$.	185
Figura 10.3 - Dependência de ΔX_A , a fração transformada até a temperatura de bobinamento, e Δt_f , intervalo de tempo no bobinamento para finalizar a transformação, no aço I-47Nb em função da deformação acima de T_{nr} , na condição $\varepsilon_2 = 0,22$, TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$.	186
Figura 10.4 - Curvas de transformação do aço I-47Nb variando-se a deformação abaixo de T_{nr} , na condição $\varepsilon_1 = 0,25$, TR = 5°C/s, $T_b = 600^\circ\text{C}$.	187
Figura 10.5 - Curvas de transformação do aço I-47Nb variando-se a deformação abaixo de T_{nr} , na condição $\varepsilon_2 = 0,22$, TR = 10°C/s, $T_b = 600^\circ\text{C}$.	188
Figura 10.6 - Dependência de ΔX_A e Δt_f do aço I-47Nb com a deformação abaixo de T_{nr} , na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $T_b = 600^\circ\text{C}$.	189
Figura 10.7 - Curvas de transformação do aço I-47Nb após diferentes deformações abaixo de T_{nr} , na condição sem bobinamento.	190
Figura 10.8 - Dependência de t_f , o tempo total de transformação, e ΔT_r , intervalo de temperatura de transformação do aço I-47Nb com a deformação abaixo de T_{nr} , na condição sem bobinamento.	191
Figura 10.9 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para diferentes taxas de resfriamento, na condição $\varepsilon_1 = 0,25$, $\varepsilon_2 = 0,22$ e $T_b = 600^\circ\text{C}$.	192
Figura 10.10 - Dependência de ΔX_A e Δt_f na transformação do aço I-47Nb com a taxa de resfriamento, na condição $\varepsilon_1=0,25$, $\varepsilon_2=0,22$; $T_b=600^\circ\text{C}$.	193
Figura 10.11 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para diferentes taxas de resfriamento, na condição sem bobinamento.	194
Figura 10.12 - Dependência de t_f e ΔT_r , na transformação do aço I-47Nb, com da taxa de resfriamento, na condição sem bobinamento.	195
Figura 10.13 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para temperaturas de bobinamento entre 650°C e 550°C na condição base de ensaio.	196
Figura 10.14 – Dependência de t_f e TMT, a taxa média de transformação após bobinamento, com a temperatura de bobinamento dos aços I-47Nb e P-68Nb.	197

Figura 10.15 – Dependência de t_f e TMT na transformação do aço I-47Nb com a temperatura de bobinamento na condição $\varepsilon_2 = 0,36$ e $TR = 10^\circ\text{C/s}$	198
Figura 10.16 - Comparação das curvas de transformação dos aços estudados para a condição base de ensaio.....	200
Figura 10.17 - Comparação dos parâmetros t_f e TMT relativos à cinética de transformação dos aços estudados.....	201
Figura 10.18 - Exemplos de curvas de transformação da austenita medidas e calculadas pela formulação de Avrami e regra da aditividade.....	206
Figura 10.19 - Relação entre os parâmetros A e B determinados nos ensaios.....	211
Figura 10.20 - Relação geral entre os parâmetros A e B para todos os aços.....	212
Figura 10.21 - Parâmetros A e B para os aços estudados comparados com resultados de literatura.....	213
Figura 10.22 - Comparação entre curvas da cinética de transformação, em dois ensaios com o aço I-47Nb, calculadas pelo presente modelo e pela formulação de Singh et al.....	215
Figura 10.23 - Gráficos da variação do parâmetro $A(Ae_3-T)$ em função do inverso da temperatura para dois ensaios com o aço I-47Nb.....	217
Figura 10.24 - Efeitos de ε_1 e ε_2 nos parâmetros A e B do modelo de cinética de transformação do aço I-47Nb.....	223
Figura 10.25 - Efeito de TR nos parâmetros A e B do modelo de cinética de transformação do aço I-47Nb.....	223
Figura 10.26 - Efeito de T_b nos parâmetros A e B do modelo de cinética de transformação do aço I-47Nb.....	224
Figura 10.27 - Comparação do parâmetro B para os aços estudados em função da temperatura de bobinamento.....	225
Figura 10.28 - Topografia da rede neural artificial utilizada para modelagem de B.....	226
Figura 10.29 - Comparação entre valores de B originais e calculados pela rede neural.....	228
Figura 10.30 - Exemplos de curvas de transformação da austenita medidas, calculadas pela formulação de Avrami e regra da aditividade, e recalculadas pelo modelo desenvolvido.....	229
Figura 10.31 - Microestruturas dos aços I-47Nb e P-48Nb após resfriamento lento interrompido por têmpera a 598°C . Ensaio na condição base.....	231
Figura 10.32 - Exemplos de microestrutura visualizadas após ataques com nital 4% (à esquerda) e solução de ácido pícrico (à direita) em corpos-de-prova do aço I-47Nb.....	233
Figura 10.33 - Diagrama de enriquecimento em C da austenita durante o ensaio na condição base do aço I-47Nb.....	236
Figura 10.34 - Frações de ferrita medida versus calculada a partir de linhas de equilíbrio de Kirkaldy.....	236
Figura 10.35 - Diferença do teor de C na austenita calculado para atingimento da linha A_{cm} por Kirkaldy e no momento de término de formação de ferrita.....	239
Figura 10.36 - Diagrama de enriquecimento em C da austenita durante o ensaio na condição base do aço I-47Nb, com as linhas A_{cm} de orto e paraequilíbrio.....	239

Figura 10.37 - Valores medidos e calculados da fração de ferrita formada nos ensaios com o aço I-47Nb. Cálculos considerando a condição de paraequilíbrio.....	241
Figura 11.1 - Microestrutura da bobina do aço I-47Nb processado industrialmente. Seção longitudinal, ataque nital 4%.....	243
Figura 11.2 - Variação de dureza em função da temperatura média de transformação, T_m , para corpos-de-prova ensaiados com resfriamento a uma taxa constante e contínua.....	247
Figura 11.3 - Efeito das variáveis estudadas na dureza dos corpos-de-prova ensaiados do aço I-47Nb.....	248
Figura 11.4 - Relação entre dureza e A_{r3} , sendo o bobinamento a 600°C.....	249
Figura 11.5 - Relação entre a dureza e a temperatura de bobinamento no aço I-47Nb.....	249
Figura 11.6 - Microestruturas de três corpos-de-prova do aço I-47Nb antes e após revenimento.....	251
Figura 11.7 - Resistência média à deformação calculada e medida durante a laminação do aço I-47Nb.....	257
Figura 11.8 - Cinética de transformação calculada para condições de processo industrial do aço I-47Nb.....	259
Figura 11.9 - Cinética calculada de formação das fases ferrita e perlita para condições de processo industrial do aço I-47Nb.....	260
Figura 11.10 - Microestruturas dos corpos-de-prova ensaiados conforme condições da Tabela 11.9.....	262

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Valores de m e n para várias condições de transformação de acordo com Tamura ⁹²	31
Tabela 3.2 - Valores de m e n para os vários modos de transformação da austenita, de acordo com Tamura ⁹²	32
Tabela 3.3 - Coeficientes das equações (3.58) e (3.59) determinados por Militzer ¹³	82
Tabela 3.4 - Principais informações relativas aos estudos de literatura sobre a transformação da austenita e seu modelamento.	89
Tabela 4.1 - Comparação entre valores de A_{e3} calculados com a rotina desenvolvida neste trabalho e os obtidos conforme se relata na literatura.	105
Tabela 5.1 - Composições químicas dos aços estudados (% em massa).	112
Tabela 5.2 - Faixa das variáveis utilizadas nos ensaios dilatométricos com corpos-de-prova de 20 mm por 10 mm.	117
Tabela 7.1 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço I-47Nb.	135
Tabela 7.2 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço P-27Nb.	138
Tabela 7.3 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço P-48Nb.	139
Tabela 7.4 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço P-68Nb.	140
Tabela 8.1 - Condições dos ensaios para têmpera do corpo-de-prova logo após o início de transformação.	143
Tabela 8.2 - Temperaturas de início de transformação médias para o aço I-47Nb.	146
Tabela 8.3 - Valores de A_{r3} calculados por equações de literatura para as condições de ensaio com o aço I-47Nb, comparados aos valores medidos e aos valores da equação desenvolvida.	159
Tabela 8.4 - Temperaturas de início de transformação medidas e calculadas para os aços processados em escala piloto.	164
Tabela 9.1 - Efeito da taxa de resfriamento na transformação da austenita e na fração de ferrita total do aço I-47Nb.	174
Tabela 9.2 - Efeito da temperatura de bobinamento na transformação do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$	176
Tabela 9.3 - Efeito da temperatura de bobinamento na transformação do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,36$ e $TR = 10^\circ\text{C/s}$	178
Tabela 10.1 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço I-47Nb.	208
Tabela 10.2 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço P-27Nb.	209
Tabela 10.3 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço P-48Nb.	209
Tabela 10.4 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço P-68Nb.	210

Tabela 10.5 - Valores de Q_R (J/mol) do aço I-47Nb, relativos a dois ensaios na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ C/s$; $T_b=600^\circ C$ e $650^\circ C$, calculados por diferentes metodologias.	219
Tabela 10.6 - Valores de k_0 (s^{-1}) do aço I-47Nb, relativos a dois ensaios na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ C/s$; $T_b=600^\circ C$ e $650^\circ C$, calculados por diferentes metodologias.	222
Tabela 10.7 - Pesos w_{ij} para cálculos dos parâmetros y_i da rede neural.	226
Tabela 10.8 - Parâmetro B determinado originalmente e recálculo pela RNA para os ensaios com o aço I-47Nb.	227
Tabela 10.9 - Pesos w_{ij} para cálculos dos parâmetros y_i da rede neural, considerando o tamanho de grão austenítico como dado de entrada.	228
Tabela 10.10 - Frações de ferrita determinadas por análises quantitativas.	234
Tabela 10.11 - Teor de C calculado na austenita no momento em que a fração transformada de austenita atinge os valores medido e calculado de ferrita.	238
Tabela 10.12 - Frações medida e calculada de ferrita formada em função de diferentes condições de ensaio, cálculos com A_{cm} de paraequilíbrio.	240
Tabela 11.1 - Durezas das fases/constituintes e média do aço I-47Nb processado industrialmente e em laboratório.	245
Tabela 11.2 - Dureza global dos corpos-de-prova ensaiados do aço I-47Nb.	246
Tabela 11.3 - Dureza e fração de ferrita medidas antes de após revenimento de três corpos-de-prova do aço I-47Nb.	252
Tabela 11.4 - Previsão da evolução da microestrutura do aço I-47Nb na etapa de desbaste.	254
Tabela 11.5 - Previsão da evolução da microestrutura do aço I-47Nb na etapa de acabamento.	255
Tabela 11.6 - Previsão da evolução da tensão média de escoamento do aço I-47Nb na etapa de desbaste.	256
Tabela 11.7 - Previsão da evolução da tensão média de escoamento do aço I-47Nb na etapa de acabamento.	256
Tabela 11.8 - Previsão da Ar_3 do aço I-47Nb processado industrialmente.	258
Tabela 11.9 - Condições dos ensaios com deformações ε_1 e ε_2 acima dos valores programados e aplicação de têmpera durante a transformação.	261
Tabela 11.10 - Tamanho de grão ferrítico e fração de ferrita da amostra industrial e de corpos-de-prova ensaiados em laboratório em diversas condições.	263
Tabela 11.11 - Previsão do tamanho de grão ferrítico por equações de literatura.	264

LISTA DE SÍMBOLOS

a: parâmetro de rede ou constante.

a_0 : constante.

A: constante do parâmetro b da cinética de transformação.

A_{cm} : linha de equilíbrio austenita/cementita.

A_{e1} : temperatura de equilíbrio do ponto invariante de formação da perlita ($^{\circ}\text{C}$).

A_{e3} : temperatura de equilíbrio austenita/austenita+ferrita ($^{\circ}\text{C}$).

A_{r1} : temperatura de formação da perlita em resfriamento contínuo ($^{\circ}\text{C}$).

A_{r3} : temperatura de início de formação da ferrita em resfriamento contínuo.

A_{rf} : temperatura de final de transformação ($^{\circ}\text{C}$).

$a_5, a_9, a_{10}, a_{11}, a_{14}$: constantes.

b: parâmetro do modelo de cinética de transformação.

B: constante do parâmetro b da cinética de transformação.

c: cementita, ou constante elástica da cadeira de laminação.

C: número de pontos tríplices por unidade de volume ou termo elástico para cálculo da carga de laminação.

C_i : porcentagem em peso do elemento i.

C_0 : teor inicial de carbono do aço (% em massa).

C_{α} ou C^{α} : teor de carbono na ferrita (% em massa ou fração molar).

C_{γ} ou C^{γ} : teor de carbono na austenita (% em massa ou fração molar).

$C_{\gamma\alpha}$: teor de carbono na austenita junto à interface α/γ (% em massa ou fração molar).

d_{α} : tamanho de grão ferrítico (μm).

d: tamanho de grão austenítico crescido após recristalização (μm).

d_y : tamanho de grão austenítico durante a laminação (μm).

d_0 : tamanho de grão austenítico inicial.

d_{rex} : tamanho de grão recristalizado.

d_{srx} : tamanho de grão recristalizado estaticamente.

D_C : coeficiente de difusão do carbono na austenita ($\text{mm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$).

E : constante.

f : fração transformada em geral.

F : força de laminação medida.

f_i : i -ésima equação homogênea de um sistema de equações.

G : velocidade de crescimento de uma nova fase ($\text{mm} \cdot \text{s}^{-1}$).

H : passo para solução de um sistema de equações.

H_i^P : energia molar padrão num estado de referência.

h_i : espessura de entrada da tira na cadeira do laminador.

h_f : espessura de saída da tira na cadeira do laminador.

J : taxa de nucleação.

J_S : frequência de nucleação por unidade de área superficial do grão.

k_i : coeficiente de partição ou constante.

k_1, k_2, k_3, k_p : constantes.

K_s : supersaturação da austenita em Nb.

L : comprimento de aresta do grão por unidade de volume.

$L_{\text{Fe}i}$: coeficiente de interação do Fe com o substitucional i .

m : constante.

m_i : massa do elemento i .

m_t : massa total da mistura.

M : mobilidade da interface de transformação.

M_0 : mobilidade intrínseca da interface.

MFS_{din} : resistência média à deformação considerando a recristalização dinâmica.

MFS_{star} : resistência média à deformação calculada através de correção da equação de Misaka.

MFS_{passe} : resistência média à deformação calculada pelo modelo.

MFS_S : resistência média à deformação calculada a partir da carga de laminação.

M_0 : mobilidade intrínseca do material.

n : constante, ou parâmetro da equação de cinética de transformação, ou rotação do cilindro de trabalho do laminador.

N : velocidade de nucleação.

N_F : quantidade de grãos de ferrita por unidade de volume.

N_S : frequência de nucleação por unidade de volume.

p : constante.

P : perlita.

ppt : precipitação.

P' : perlita degenerada.

PM_i : peso molecular do elemento i .

q : constante.

Q : fator geométrico para cálculo da carga de laminação pela equação de Sims.

Q_D : energia de ativação para a difusão do carbono na austenita.

Q_F : ferrita quasi-poligonal.

Q_M : energia de ativação para os átomos cruzarem a interface austenita/ferrita.

Q_R : parâmetro relacionado à cinética de transformação.

r : raio da ponta de uma ripa de bainita em crescimento, ou redução no passe de laminação.

R: raio do grão de ferrita em crescimento, ou constante universal dos gases, ou raio do cilindro de trabalho de laminação.

R': raio deformado do cilindro de trabalho.

R_i: raio do cilindro de trabalho.

RDX: recristalização dinâmica.

s: constante.

S: área de contorno de grão.

t: tempo.

t_f: tempo total da transformação.

t_e: tempo entre passes na laminação.

t_d: tempo de deformação no passe (tempo de passagem do arco de contato).

t_p: tempo do passe de laminação.

t_{ip}: tempo entre as deformações.

t_{ps}: tempo para ocorrer início de precipitação após a deformação.

t₉₅: tempo necessário para ocorrer recristalização estática ou metadinâmica em 95% do material.

T: temperatura.

T_b: temperatura de bobinamento.

T_{e2}: temperatura do segundo passe nos ensaios laboratoriais.

T_i: temperatura de interrupção da transformação para ferrita e perlita.

T_{req.}: temperatura de reaquecimento da placa no processo industrial.

TR: taxa de resfriamento.

T₁, T₂, T₃: fatores de cálculo da resistência à deformação na laminação por Sims.

t_{vi}: tempo virtual para transformação.

V: velocidade de migração da interface.

V_e: velocidade de saída da tira da cadeira.

V_r : velocidade periférica do cilindro de laminação.

X : fração transformada, ou fração recristalizada estática ou metadinâmica.

X_{din} : fração recristalizada dinâmica.

X_e : fração de volume estendido.

X_i^k : fração molar do elemento i na fase k .

X_F, X_P : frações de ferrita e de perlita.

X_{FP} : fração de ferrita poligonal.

X_{Ft} : fração total de ferrita.

X_0 : fração molar inicial da liga.

$[x]$: vetor de incógnitas de um sistema de equações.

Z : fator de não-equilíbrio de Zeldovich, ou parâmetro de Zener-Holomon.

y_i : constantes de um sistema de equação.

Y : espessura da chapa na posição do ângulo neutro.

Y_M^c : fração de sítios na cementita ocupados pelo substitucional M .

w : largura da tira.

α : fase ferrita, ou ângulo de mordida.

$[\alpha]$: vetor solução de um sistema de equações.

β : constante.

β^* : fator de frequência.

$[\delta_k]$: vetor incremento de solução de um sistema de equações.

ϕ_N : ângulo neutro.

$\Delta G^{\gamma\alpha}$: diferença de energia livre entre as fases austenita e ferrita.

$\Delta G_{quim.}$: força motriz para transformação devido à diferença de potencial químico.

$\Delta G_{def.}$: força motriz para transformação devido à deformação.

ΔG^* : energia livre de formação de um núcleo.

- Δt : tempo de resfriamento lento nos ensaios laboratoriais.
- ΔT : super-resfriamento abaixo de Ae_1 .
- Δt_v : intervalo de tempo virtual na aplicação da regra da alavanca.
- ΔXA : fração transformada até o bobinamento.
- ε : deformação verdadeira em geral.
- $\varepsilon_{aplicada}$: deformação aplicada no passe.
- ε_{passe} : deformação do passe incluindo a deformação redundante.
- ε_r : deformação redundante.
- ε_c : deformação crítica para ocorrer RDX.
- ε_{ac} , ε_{res} : deformação acumulada na austenita.
- $\varepsilon_{0,5din}$: deformação necessária para ocorrer 50% de recristalização dinâmica.
- $\dot{\varepsilon}$: taxa de deformação.
- ε_1 : deformação aplicada no primeiro passe nos ensaios laboratoriais.
- ε_2 : deformação aplicada no segundo passe nos ensaios laboratoriais.
- ε_{ik} : parâmetro de interação entre os elementos i e k de Wagner.
- γ : fase austenita.
- μ_i^j : potencial químico do elemento i na fase j .
- η_0 , ϕ , ψ_i , ψ_0 : funções matemáticas para aproximação de solução numérica.
- ρ , ρ_s : densidade de deslocações na austenita deformada.
- σ_{Misaka} : resistência à deformação calculada pela equação de Misaka.
- σ_{ss} : resistência à deformação no estado estacionário após recristalização dinâmica.
- τ : tempo para início de transformação.

1. INTRODUÇÃO

No processo convencional de laminação de tiras a quente de aços, a temperatura do material após a sua passagem pela última cadeira do trem acabador é da ordem de 900°C, de forma que a sua microestrutura é constituída por austenita. No trajeto subsequente até a bobinadeira, a tira é submetida a resfriamento forçado por água, até que seja atingida a temperatura visada para o bobinamento, na faixa usual de 550°C a 750°C. A taxa média de resfriamento entre o acabamento e a bobinadeira situa-se entre 10°C/s e 20°C/s. Após o bobinamento, a tira é resfriada lentamente até a temperatura ambiente. Durante estas etapas de resfriamento, a austenita se transforma nos constituintes finais do aço como laminado a quente.

Essa transformação apresenta dois aspectos tecnológicos muito importantes: (i) as propriedades mecânicas finais do aço são ditadas pelas suas características microestruturais finais, tais como: constituintes formados e suas frações volumétricas, tamanho de grão ferrítico e distribuição de precipitados; (ii) na transformação ocorre liberação de calor latente, o qual afeta a taxa de resfriamento, que, por sua vez, afeta a transformação, ou seja, são parâmetros mutuamente dependentes.

Com relação à determinação da microestrutura formada, os diagramas de transformação em resfriamento contínuo (diagramas CCT) são as ferramentas tradicionais utilizadas. No entanto, um diagrama CCT somente é válido para um tamanho de grão austenítico específico, ou seja, não representa uma forma genérica de interpretar o comportamento do aço durante a transformação, e não informa a cinética de transformação como um todo. Além disso, sua construção é bastante trabalhosa. Assim, é altamente desejável dispor-se de uma metodologia que possa prever a transformação de fases em condições de resfriamento contínuo típicas de linhas de laminação de tiras a quente. Muitos esforços de pesquisa¹⁻⁶ têm sido dedicados ao assunto no sentido de desenvolver modelos matemáticos para prever aspectos da microestrutura final e a cinética de transformação. Tais modelos podem ser usados para simulação *off line* e mesmo para controle *on line* do processo, e têm como objetivo final prever e/ou controlar as propriedades mecânicas finais via microestrutura.

Com relação à influência da transformação nas condições de resfriamento, o conhecimento da cinética de transformação pode ser incorporado em modelos matemáticos de transferência de calor para controle do processo de resfriamento⁶⁻¹⁰. Na maioria dos modelos que são desenvolvidos, a transformação da austenita é ignorada^{11,12}, sendo que em alguns ela é incorporada, de forma indireta, através dos valores de calor específico do material¹². Mas essa forma indireta também apresenta uma limitação, pois os valores tabelados de calor específico são para condições de equilíbrio, que ocorrem em aquecimento ou resfriamento extremamente lentos, o que é distante das condições existentes na mesa de resfriamento de linhas de tiras a quente. Portanto, modelos matemáticos de previsão da cinética de transformação são muito úteis ao serem acoplados a modelos de transferência de calor durante o resfriamento da tira, visando um melhor controle do processo.

Apesar dos constantes esforços de pesquisa voltados para o modelamento da transformação da austenita, poucos trabalhos têm sido direcionados para aplicação às condições do processo industrial^{6,13-14}. As seguintes constatações são realizadas ao se analisar a literatura pertinente:

- a) toda a fundamentação teórica para a transformação de fase, em termos de mecanismos e equacionamento para a nucleação e crescimento de uma nova fase, se restringe à condição de transformação isotérmica, quase não utilizada em processos industriais;
- b) nas formulações teóricas, existe uma quantidade muito grande de parâmetros fundamentais, os quais nem sempre são medidos com suficiente precisão;
- c) a maioria dos estudos são voltados apenas para a transformação da austenita para a ferrita, o que limita a aplicação de formulações desenvolvidas quando existem outros constituintes em proporções significativas;
- d) o modelamento da transformação de constituintes formados a baixa temperatura, tais como a bainita ainda está longe de ser definitivamente estabelecido;
- e) muitos estudos contemplam apenas a caracterização dos produtos da transformação, sem considerar a cinética de transformação;

- f) muitas vezes, as condições de ensaio estão longe de reproduzir as condições existentes no processo industrial;
- g) a maioria dos elementos químicos presentes nos aços exercem efeito significativo na termodinâmica e na cinética de transformação, o que aumenta o número de variáveis a ser considerado, limitando a aplicabilidade dos estudos a composições químicas específicas;
- h) por sua maior simplicidade, os aços CMn têm sido os mais estudados, em detrimento dos aços microligados de alta resistência.

Diante dessas observações, conclui-se que existe, ao mesmo tempo, uma importância grande e um amplo espaço para avanço no conhecimento e no modelamento da transformação de fases durante o resfriamento de tiras a quente, especialmente no caso de aços microligados de alta resistência.

Para aços CMn já existem modelos matemáticos desenvolvidos que prevêem a transformação da austenita na mesa de resfriamento, inclusive do próprio autor deste trabalho¹⁵⁻¹⁷. Nesses aços, a transformação praticamente se completa antes do bobinamento, particularmente para os aços de baixo teor de carbono. Todavia, para os aços microligados de alta resistência, a faixa de temperaturas de transformação é inferior à dos aços CMn e se estende até o resfriamento do material já bobinado. Portanto, a transformação passa por dois regimes distintos de resfriamento, o primeiro sob altas taxas durante a passagem pela mesa, e o segundo, após o bobinamento. O enfoque de resfriamento em dois regimes, do ponto de vista de modelamento matemático, não foi realizado por nenhum pesquisador na literatura consultada. Esse é um dos enfoques propostos nesse trabalho, a ser tratado de forma inédita.

A transformação da austenita em tiras a quente de aços microligados de alta resistência, considerando-se a realidade do processo industrial, depende de sua condição prévia, da composição química do aço e da taxa de resfriamento. As variáveis que definem a condição da austenita são o tamanho de grão recristalizado, ou seja, o grão obtido após o último passe em que houve recristalização completa, a quantidade de deformação acumulada abaixo da temperatura de não-recristalização, os teores dos elementos microligantes (especialmente o Nb) em solução sólida e a quantidade e tamanho dos

precipitados presentes. Portanto, um modelo completo de transformação deve levar em conta todas essas variáveis, ainda que seja de forma indireta.

O objetivo do trabalho desta tese foi modelar a transformação da austenita, presente ao final da laminação de tiras a quente de um aço CMn microligado ao V e Ti e teores variados de Nb. Para isso, foram realizados, basicamente, ensaios onde a transformação foi monitorada por dilatométrica, após os corpos-de-prova serem submetidos a austenitização seguida de deformações em temperaturas acima e abaixo da temperatura de não recristalização (T_{nr}). Também foi variada a taxa de resfriamento antes do início da transformação. Em determinadas temperaturas, consideradas como representativas do bobinamento, o resfriamento rápido foi alterado para uma taxa muito baixa, próxima da taxa medida no processo de resfriamento da bobina. Foram desenvolvidas formulações semi-empíricas e empíricas para prever a temperatura de início de transformação, A_{r3} , a cinética de transformação, os constituintes formados e suas frações volumétricas e a dureza resultante. Nesta tese são mostradas uma revisão bibliográfica sobre o modelamento da transformação de fases, a metodologia e os ensaios realizados, os principais resultados obtidos juntamente com sua interpretação, e finalmente, os modelos desenvolvidos. Além disso, são mostrados, sucintamente, os cálculos termodinâmicos realizados e que foram aplicados ao modelamento da transformação.

2. OBJETIVOS

Objetivo Geral:

Desenvolver um modelo matemático para prever a transformação de fases de um aço de alta resistência microligado ao Nb-V-Ti, que ocorre após a laminação em tiras a quente, baseando-se em ensaios dilatométricos que representem aproximadamente as condições existentes no processo industrial.

Objetivos específicos:

- Desenvolver a metodologia de ensaios dilatométricos na Gleeble, envolvendo ciclos termomecânicos nos corpos-de-prova, onde são aplicadas deformações por compressão, seguidas do resfriamento controlado em dois regimes distintos até o final da transformação.
- Estudar os efeitos do tamanho de grão da austenita e seu grau de encruamento, das condições de resfriamento e do teor de Nb no aço, na transformação da austenita nas condições dos ensaios dilatométricos.
- Estabelecer um modelo de previsão da temperatura de início de transformação da austenita em função das variáveis de processo.
- Desenvolver uma formulação para previsão da cinética global de transformação da austenita em função das variáveis de processo.
- Desenvolver um procedimento matemático para prever a microestrutura formada do aço estudado após a laminação em tiras a quente.

3. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1. Conceitos Fundamentais sobre a Transformação da Austenita nos Aços

3.1.1. A transformação no contexto do diagrama Fe-C

Embora os aços sejam ligas de Fe com adições de vários elementos químicos, a utilização do diagrama Fe-C é muito útil para entendimento de alguns aspectos da decomposição da austenita e para estabelecimento de uma terminologia básica. A Figura 3.1-a mostra a parte do diagrama Fe-C de interesse para interpretação dessa transformação. Resfriando-se lentamente um aço hipoeutetóide, inicialmente na condição de austenitizado, a austenita começa a se decompor em ferrita quando a temperatura atinge a linha Ae_3 . Quando a temperatura atinge Ae_1 , termina a formação da ferrita, chamada então de proeutetóide, e forma-se o constituinte perlita. Em ligas Fe-C, o ponto eutetóide é um invariante, e significa que toda a perlita se forma na temperatura Ae_1 . Nos aços, entretanto, a regra das fases de Gibbs mostra que existe um campo para formação da perlita, ou seja, sua formação estende-se num intervalo de temperatura, como ilustra a Figura 3.1-b.

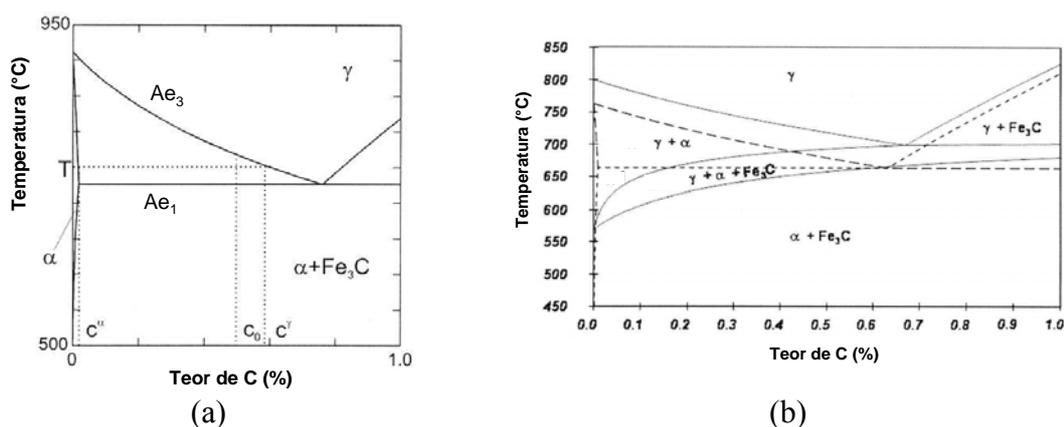


Figura 3.1 - Diagrama de equilíbrio Fe-C destacando a região de transformação da austenita, para um sistema binário Fe-C, em (a), e para uma liga Fe-C-M, em (b), onde M representa soluto substitucional¹⁸.

Condições de resfriamento lentas o suficiente para que o equilíbrio termodinâmico seja atingido, tal como o mostrado na Figura 3.1-a, raramente ocorrem em situações de interesse prático. Taxas de resfriamento tão baixas quanto $0,1^{\circ}\text{C/s}$ ainda não são

suficientes para atingir o equilíbrio^{19,20}. Na verdade, para que a transformação seja termodinamicamente possível é necessário que haja, sempre, algum sub-resfriamento. Portanto, em condições de resfriamento contínuo, a temperatura de início de formação da ferrita fica abaixo da Ae_3 , sendo denominada Ar_3 . Por sua vez, a temperatura de formação da perlita, abaixo de Ae_1 , é denominada Ar_1 .

A força motriz para a transformação da austenita é o decréscimo de energia livre total do sistema, a qual inclui as contribuições devido à variação de potencial químico dos elementos, além de variações das energias de superfície e de deformação elástica. A componente química é a principal delas. A Figura 3.2 ilustra as curvas esquemáticas de energia livre (química) para a austenita e a ferrita, numa temperatura constante definida, em função do teor de C. A figura mostra que, nessa temperatura, a transformação da austenita em ferrita é acompanhada de um decréscimo de energia livre dado por ΔG_m . A partir desse diagrama, pode-se também visualizar quais são os teores de C em equilíbrio nessas fases. Evidentemente que para a transformação ocorrer em condições de equilíbrio, é necessária a partição de C entre as fases. Como o aço possui diversos elementos substitucionais e intersticiais, o mesmo raciocínio feito para o C é aplicável, porém a interpretação dos diagramas de energia livre se torna muito mais complexa. De qualquer forma, pode ser necessária a partição de elementos substitucionais entre as fases. Mais detalhes sobre este assunto são dados no item 3.2.

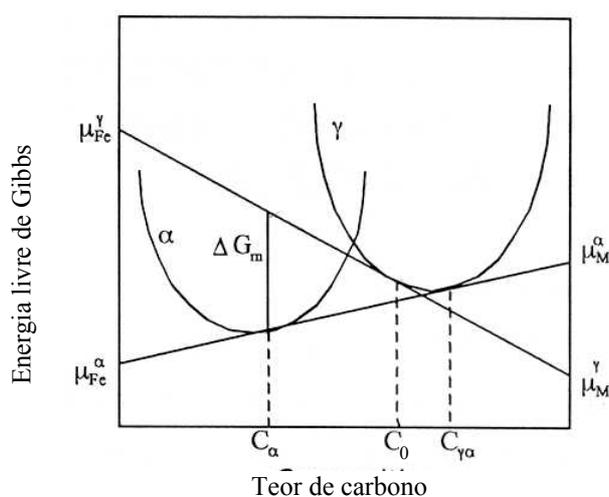


Figura 3.2 - Diagrama esquemático de energia livre de Gibbs⁶ das fases austenita e ferrita.

O diagrama da Figura 3.1 indica que apenas os constituintes ferrita e cementita são formadas em condições de transformação em equilíbrio. A ferrita formada em condições não muito longe do equilíbrio possui forma aproximadamente equiaxial, sendo chamada também de ferrita poligonal. Porém, quando estão presentes fatores tais como grão austenítico grande, e/ou elevadas taxas de resfriamento e/ou presença de elementos químicos tais como o Mn, a temperatura de início de transformação é significativamente reduzida, o que leva à formação de microestruturas não previstas pelo equilíbrio. A ferrita formada nessas condições não é mais poligonal, mas assume geometrias tendendo para placas/agulhas, por questões energéticas. Em temperaturas ainda mais baixas de transformação, são formadas a bainita e a martensita. O item 3.1.3 mostra mais detalhes sobre estas microestruturas.

3.1.2. Transformação difusional e transformação adifusional

Quando a decomposição da austenita ocorre em temperaturas muito elevadas, existem condições cinéticas para que os elementos em solução sólida se redistribuam entre as fases presentes, conforme seus potenciais termodinâmicos. A redistribuição ocorre por difusão e sua extensão depende, para cada elemento, da sua tendência em permanecer em cada fase, ou seja do potencial químico, e da sua mobilidade, dada pela difusividade. Nessas condições, a transformação fica controlada pela difusão dos elementos em solução sólida, sendo então chamada de transformação difusional. Transformações em altas temperaturas são favorecidas por baixas taxas de resfriamento, pequeno tamanho de grão austenítico e por aços com baixos teores de elementos estabilizadores da austenita, tal como o Mn.

Não é necessário que todos os elementos substitucionais existentes no aço sejam redistribuídos para que a transformação seja considerada difusional. Os elementos intersticiais, tais como o C, difundem muito mais facilmente que os substitucionais. Basta que um elemento, normalmente o C, seja redistribuído para que a transformação seja difusional^{21,22}.

A redistribuição dos elementos substitucionais durante a decomposição da austenita tem sido estudada ao longo dos anos, mas ainda não existe um conhecimento sólido sobre o assunto. Elementos tais como Mn, Si e Ni têm sido bastante estudados com relação ao

seu comportamento durante a decomposição da austenita²³⁻²⁶. Para isso, cálculos termodinâmicos em diversas condições de equilíbrio, tais como ortoequilíbrio, paraequilíbrio e equilíbrio apenas local, têm auxiliado na interpretação do comportamento dos aços. Maiores detalhes sobre essas condições de equilíbrio são dadas no item 3.2. Por exemplo, Gupta²⁶ mostrou, através de medições experimentais e cálculos termodinâmicos, que na transformação isotérmica da austenita para ferrita em um aço microligado ao Nb, ocorre redistribuição do Mn para temperaturas acima de 740°C somente. Isso sugere que a cinética de transformação acima de 740°C depende da difusividade do Mn na austenita.

A transformação da austenita para ferrita poligonal é difusional. Portanto, o modelamento dessa transformação por fundamentos teóricos requer o desenvolvimento de equações que levem em conta a difusão do C na austenita. A Figura 3.3 ilustra o perfil de concentração de C nas proximidades da interface austenita/ferrita durante a transformação. Para um aço de composição inicial C_0 , a concentração na interface do lado da ferrita é a concentração de equilíbrio C_α , enquanto que na interface do lado da austenita é C_γ . Como C_γ é muito maior que C_α , ocorre um enriquecimento da austenita em C ao longo da transformação. Numa situação ideal, admitindo-se um grão austenítico de tamanho infinito, o perfil de concentração mostrado na Figura 3.3 permaneceria constante durante toda a transformação. Na realidade, os grãos da austenita são de tamanho finito e a ferrita nucleia preferencialmente nos contornos desse grão, do modo que gradientes de concentração de C são gerados a partir de todos os pontos de nucleação no contorno. Com o avanço da interface, chega um instante em que a região central do grão austenítico é afetada simultaneamente pelos gradientes de concentração decorrentes das várias direções, não se mantendo mais a forma mostrada na Figura 3.3. Na literatura, essa condição é chamada de *soft impingement*.

O trabalho pioneiro para estabelecer formulações para o avanço da interface de transformação por difusão foi realizado por Zener²⁸. Posteriormente, Hillert²⁹⁻³⁰ introduziu diversas melhorias na formulação original de Zener, chegando a uma expressão muito citada atualmente e conhecida como equação de Zener-Hillert. Ao longo dos anos, vários^{6,7,21,22} estudos têm se baseado na equação de Zener-Hillert, ou em adaptações³¹, para o modelamento da cinética de decomposição da austenita em ferrita.

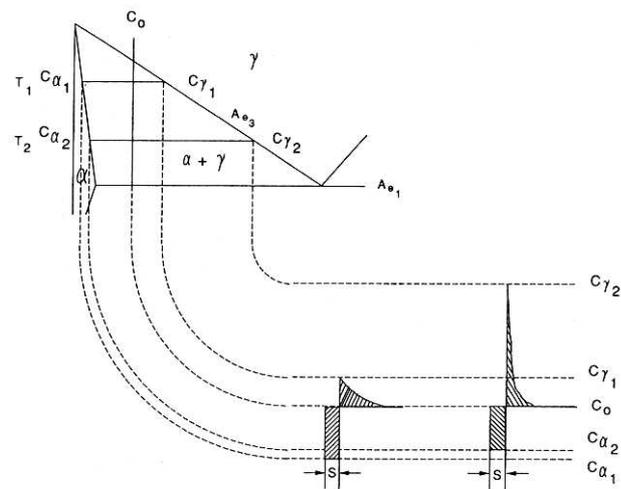


Figura 3.3 - Diagrama esquemático da região hipoeutetóide do diagrama de equilíbrio Fe-C, mostrando os perfis de concentração de C à frente da interface de transformação em duas temperaturas²⁷.

Vários estudos criteriosos baseados em observações experimentais, em especial os realizados por Hillert^{29,32}, mostraram que a decomposição da austenita em perlita também ocorre com controle difusional. É necessária a difusão do C da austenita original para a nucleação das lamelas de cementita, num mecanismo cooperativo de formação de lamelas intercaladas de ferrita.

Uma vez que os mecanismos das transformações difusionais têm sido mais intensamente estudados e compreendidos, e que na maioria dos aços para aplicações comuns a microestrutura dominante é composta por ferrita poligonal e perlita, a maioria dos modelos matemáticos desenvolvidos são para esses aços.

Nas transformações adifusionais não ocorre redistribuição dos elementos em solução sólida, por não haver mobilidade suficiente dos elementos. A transformação ocorre por um deslocamento simultâneo de átomos, por cisalhamento da rede. Tais transformações são típicas de baixas temperaturas. A decomposição da austenita em martensita é uma transformação tipicamente adifusional, embora, em aços com baixo teor de C, alguma difusão de curto alcance desse elemento possa ocorrer.

Os mecanismos de formação da bainita têm sido estudados ao longo dos anos e ainda existe um debate sobre qual mecanismo prevalece, se um difusional, adotado por uma linha de pesquisadores, especialmente por Aaronson e colaboradores³³, ou se o

mecanismo é por deslocamento, especialmente defendida por Bhadeshia e colaboradores³⁴.

3.1.3. Microestruturas obtidas após transformação da austenita

Os constituintes resultantes da decomposição da austenita em aços tradicionais de baixo e médio carbono são ferrita, perlita, bainita e martensita. De uma forma geral, a identificação da ferrita poligonal, da perlita e da martensita é relativamente fácil, mesmo por microscopia ótica. Além disso, seus mecanismos de formação já estão bem estabelecidos. Exceção se faz quando tais constituintes ocorrem em baixas frações volumétricas, em ilhas no material, onde a forma da perlita esteja degenerada ou a martensita esteja associada com a austenita. No entanto, quando são formados produtos de transformação em temperaturas intermediárias, caracterizados por formas aciculares, tais como do tipo da bainita, fica bastante difícil sua correta caracterização.

Nos aços de alta resistência microligados ao Nb e com baixo teor de C, várias morfologias de ferrita não poligonal podem ser obtidas, em faixas intermediárias de transformação isotérmica, ou em taxas relativamente altas de resfriamento contínuo. Muitas vezes, a aparência da microestrutura obtida é semelhante à da bainita, que leva alguns investigadores a classificar tal microestrutura como bainita. Todavia, Hillert e Purdy³⁵ alertam que a bainita é um agregado de ferrita e cementita, resultante da decomposição eutetóide da austenita, assim como a perlita, e não deve ser confundida com outras formas de ferrita.

Krauss e Thompson³⁶ fizeram uma revisão de literatura sobre os tipos de ferrita encontrados nos aços de baixo e ultrabaixo carbono. Nesse trabalho são apresentados os seguintes esquemas de classificação de microestruturas nos aços: (i) microestruturas bainíticas classificadas por Aaronson e colaboradores; (ii) classificação de microestruturas gerais nos aços por Bramfitt e Speer; (iii) classificação dos tipos de ferrita, por Ohmori; (iv) classificação dos tipos de microestruturas segundo a Comissão de Bainita do Instituto de Siderurgia Japonês (ISIJ).

Além da revisão de Krauss e Thompson³⁶, na literatura consultada os artigos de Thomson et al.³⁷ e Cizek et al.³⁸ detalham diversas formas de ferrita caracterizada em seus estudos. Adicionalmente, os textos de Venkatraman et al.³⁹ e Yamamoto et al.⁴⁰

caracterizaram as microestruturas dos aços estudados. Nessas quatro referências, foram utilizados aços de baixo C ($\sim 0,05\%$), baixa liga e alta resistência, microligados ou não, e sujeitos a resfriamento contínuo diretamente após encharque ou após deformação da austenita.

Baseando-se nas cinco referências citadas no parágrafo anterior, são mostrados a seguir os tipos de ferritas caracterizadas.

3.1.3.1. Ferrita poligonal (FP)

Também chamada de ferrita equiaxial por Krauss e Thompson³⁶, é a ferrita proeutetóide formada em taxas de resfriamento relativamente baixas. Possui baixa densidade de deslocamentos e ausência de subestrutura. Essa ferrita nucleia nos contornos de grão da austenita e é facilmente identificável ao microscópio ótico. A Figura 3.4 ilustra este tipo de ferrita.



Figura 3.4 - Exemplo de microestrutura constituída de ferrita poligonal em aço HSLA 80, transformado isotermicamente a 675°C por 500 s. As áreas escuras são martensita formada durante têmpera da amostra³⁶.

3.1.3.2. Ferrita de Widmanstätten (FW)

É constituída de grãos grosseiros e alongados de ferrita, normalmente nucleada no contorno de grão austenítico. Se nucleada nesse local, costuma também ser chamada de placas laterais de Widmanstätten (*Widmanstätten side-plates*). Segundo Krauss e

Thompson³⁶, essa ferrita não possui subestrutura, enquanto Cizek et al.³⁸ citam que possui. Thompson et al.³⁷ caracterizaram essa ferrita conjuntamente com a ferrita poligonal. A Figura 3.5 ilustra esse tipo de ferrita.

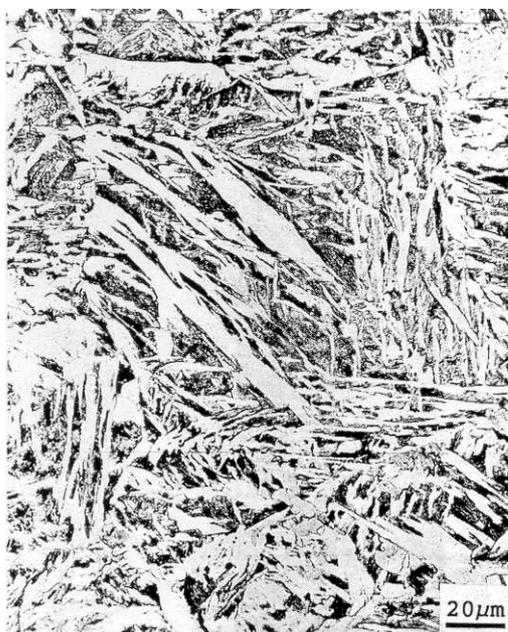


Figura 3.5 - Ferrita de Widmanstätten (grãos grandes brancos alongados) formados no aço HSLA 80, transformado isotermicamente a 600°C por 100 s. As regiões escuras são martensita formada durante resfriamento rápido³⁶.

3.1.3.3. Ferrita quasi-poligonal ou ferrita massiva (FQ)

Krauss e Thompson³⁶ e Cizek et al.³⁸ citam que FQ é formada em aços com teor de C muito baixo, resfriados rapidamente sem que haja variação de composição química durante a transformação. Com isso são formados grãos de ferrita relativamente grosseiros, com contornos irregulares, e presença de subestrutura e alta densidade de deslocamentos. Pode haver alguma quantidade de martensita/austenita (MA). Yamamoto et al.⁴⁰ também caracterizaram a ferrita quasi-poligonal, mas Thompson et al.³⁵ não citaram tal constituinte. A Figura 3.6 ilustra esse tipo de microestrutura.



Figura 3.6 - Ferrita quasi-poligonal formada em um aço ultrabaixo C contendo 3% de Mn, resfriado a 50°C/s ³⁶.

3.1.3.4. Ferrita acicular ou ferrita bainítica (FA ou FB)

Aumentando-se a taxa de resfriamento em aços baixo e ultrabaixo C, formam-se cristais de ferrita mais finos que os citados acima, na forma de pacotes de ripas ou de placas, tendo constituintes MA também de forma acicular³⁶. Como os contornos da ferrita são de baixo ângulo, eles não são resolvidos ao microscópio ótico. Os contornos originais da austenita são preservados. Como é um constituinte de baixa temperatura, existe elevada densidade de deslocamentos. A Figura 3.7 ilustra esse tipo de ferrita.

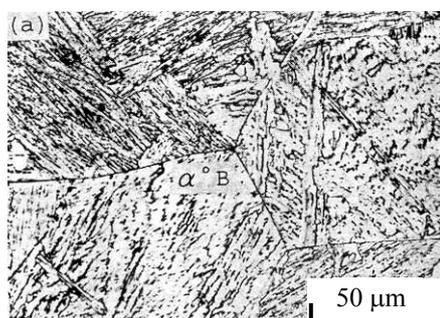


Figura 3.7 - Ferrita bainítica formada em um aço baixo C microligado ao Nb e Ti, resfriado a 5°C/s a partir da austenita não deformada com tamanho de grão de $200\ \mu\text{m}$ ⁴⁰.

3.1.3.5. Ferrita granular ou ferrita bainítica granular (FG)

A ferrita granular possui muitas similaridades com a ferrita acicular³⁶. Possui alta densidade de deslocamentos e subestrutura. De acordo com Krauss e Thompson³⁶, parece que essa ferrita se forma em velocidades de resfriamento ligeiramente menores que a ferrita acicular. Ainda segundo esse autor, os cristais de ferrita são equiaxiais ou granulares, enquanto que Cizek et al.³⁸ citam que os cristais de ferrita possuem formato de folhas alongadas. A Figura 3.8 ilustra essa ferrita.



Figura 3.8 - Ferrita granular formada em resfriamento contínuo a 1°C/s de um aço baixo C com adições de Mn-Cu-Ni-Cr-Mo³⁶.

3.2. Termodinâmica da Transformação

Uma transformação de fase só ocorre diante da existência de uma força motriz, que é representada pela redução da energia livre total do sistema. Já foi mostrado na Figura 3.2, de uma forma muito simples, o conceito de força motriz para a transformação da austenita. Não é objetivo de este texto discutir detalhes sobre a termodinâmica dessa transformação, mas apenas ampliar alguns conceitos básicos sobre o assunto, que são necessários em estudos fundamentais, especialmente no modelamento da transformação. Em recente conferência mundial sobre a transformação da austenita, os aspectos termodinâmicos foram intensivamente discutidos pela comunidade acadêmica^{18,24,41-45}.

Para ilustrar alguns desses conceitos, apresenta-se a Figura 3.9, que fornece informações adicionais às fornecidas pela Figura 3.2. Para uma liga Fe-C de composição x_0 , as concentrações de equilíbrio na ferrita, x_e^α , e na austenita, x_e^γ , são dadas pela tangente comum às curvas de energia livre, conforme já mostrado na Figura 3.2. Na condição de equilíbrio, os potenciais químicos do Fe e do C são iguais na austenita e na ferrita, de forma que através da interface não existe força motriz para a transformação. Toda a força motriz deriva do gradiente de concentração dentro da austenita, onde a cinética é dada pela velocidade de difusão. Isso significa que a mudança de reticulado ocorre instantaneamente, ou seja, a mobilidade da interface seria infinita. Inden e Hutchinson⁴⁵ chamam a atenção, porém, que essa mobilidade tem que ser finita e, portanto, precisa existir uma diferença de potencial do Fe, na interface, entre os lados da austenita e da ferrita. Isso pode ser visualizado na Figura 3.9 pelas linhas tracejadas, que definem as composições (teor de C) na interface do lado da austenita, $x^{\gamma/\alpha}$, e do lado da ferrita, $x^{\alpha/\gamma}$. O potencial de C nessas duas posições é o mesmo, mas o do Fe é diferente, o que fornece a força motriz para a mudança do reticulado e, assim, uma contribuição necessária para a transformação, segundo os autores. Com isso, o modelamento da cinética de transformação necessita das concentrações nas interfaces de acordo com essa interpretação, e não simplesmente das concentrações de equilíbrio.

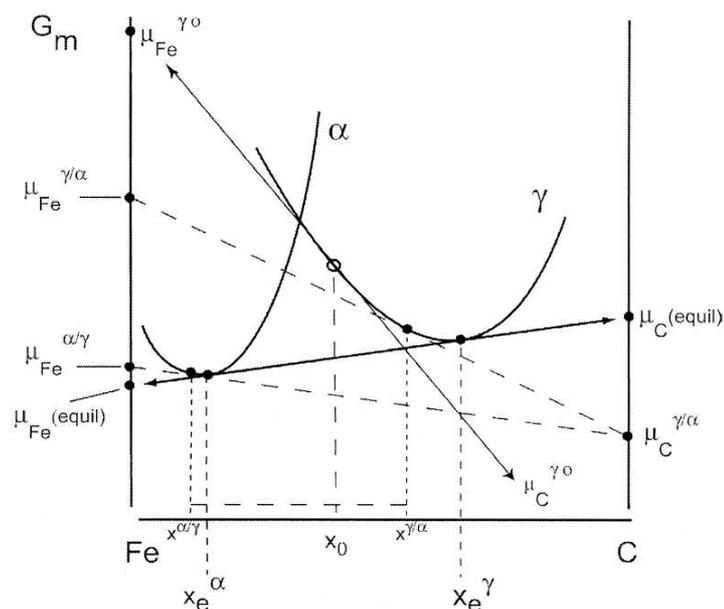


Figura 3.9 - Curvas de energia livre de Gibbs para as fases α e γ no sistema Fe-C⁴⁵.

Assim, o papel da termodinâmica nos modelos de transformação de fase é estabelecer qual a força motriz e quais as concentrações dos elementos na interface de reação. Associada à termodinâmica, está a cinética que deve prever, no caso de transformações difusionais, o avanço da interface baseado na difusão de longo alcance dos elementos para a austenita. Dois aspectos são fundamentais nesse contexto e são apresentados, de forma sucinta nessa proposta: (i) o tipo de modelo termodinâmico; (ii) a condição de equilíbrio na interface.

3.2.1. Modelos termodinâmicos

Existem alguns tipos de modelos desenvolvidos e que têm sido aplicados no estudo da transformação de fases, tais como: o modelo de solução regular de Hillert e Staffanson⁴⁶ (HS), o modelo estatístico termodinâmico²² (modelo quasi-químico), modelo de átomos centrais⁴⁷, o modelo simplificado de aproximação de Wagner⁴⁸ e o modelo geométrico de Kaufman et al.³¹. Pan²² fez uma comparação entre os modelos quasi-químico, HS e de aproximação de Wagner, e concluiu que os resultados fornecidos pelos dois últimos foram semelhantes, mas diferentes do primeiro. Devido à menor complexidade, ele optou pela utilização do modelo de aproximação de Wagner. Por outro lado, Shiflet et al.⁴⁹ realizaram uma discussão pormenorizada dos conceitos termodinâmicos da decomposição da austenita em ferrita, o que auxilia o entendimento do assunto.

O modelo de Hillert-Staffanson foi desenvolvido originalmente para tratar soluções iônicas, mas tem sido largamente utilizado em estudos de transformação de fase, especialmente da austenita para ferrita. Na maioria das vezes sua utilização se dá indiretamente através do *software* comercial Thermocalc⁴², que tem como base a formulação de Hillert-Staffanson. É um modelo físico que considera duas sub-redes, uma dos átomos substitucionais e outra dos átomos intersticiais.

De acordo com Pan²², o modelo quasi-químico é assim denominado porque o cálculo da energia livre envolve equações correspondentes a uma reação química. Nesse modelo, somente as contribuições químicas para a variação de energia livre são consideradas.

O modelo de átomos centrais foi desenvolvido por Enomoto e Aaronson⁴⁷ para avaliação das linhas de equilíbrio ferrita/austenita no sistema Fe-C-M, onde M é um elemento substitucional. A formulação deste modelo é bastante complexa e não tem

havido citações de sua utilização nos modelos de transformação, exceto em outro trabalho de um dos autores da formulação⁵⁰.

No modelo da aproximação de acordo com Wagner são utilizadas aproximações para os coeficientes de atividade dos elementos através de séries de Taylor. Este é um dos modelos mais simples que foi aplicado de forma pioneira e utilizado intensamente, após obtenção da base de dados necessária, nos trabalhos de Kirkaldy e colaboradores^{48,51-52}, e posteriormente pela equipe de Militzer e colaboradores⁵³⁻⁵⁶. O presente autor também utilizou este modelo nos cálculos termodinâmicos empregados no desenvolvimento de modelos de transformação da austenita em aços CMn¹⁵⁻¹⁷. Na formulação de Kirkaldy, as linhas de equilíbrio Ae_3 , Ac_m e a linha de solubilidade do C na ferrita são calculadas para aços contendo adições de Mn, Si, Ni, Cr, Cu e Mo. Li et al.⁵⁷ ampliaram a base de dados para essa formulação incluindo elementos de microliga, usuais nos aços modernos de alta resistência.

O modelo de Kaufman et al.³¹ para decomposição da austenita em temperaturas abaixo da eutetóide é específico para a liga Fe-C, não incluindo elementos substitucionais. É um modelo geométrico por considerar os possíveis locais de posicionamento dos átomos de C na rede do Fe. Na literatura consultada, apenas Suehiro e colaboradores^{6,7} utilizaram o modelo de Kaufman et al. para cálculo da força motriz na transformação da austenita em aços CMn, porém a base de dados termodinâmicos foi a de Uhrenius⁵⁸.

A maioria dos pesquisadores na área de modelamento da transformação de fase têm usado, atualmente, pacotes comerciais para cálculos termodinâmicos, tais como o Thermocalc⁵⁹⁻⁶², MTDATA⁶³⁻⁶⁴, ChemSage^{14,41}. Isto porque os cálculos, de alta complexidade, já estão padronizados e são facilmente executados e comparados. Por exemplo, a equipe de Militzer, que anteriormente usava a formulação e base de dados de Kirkaldy, passou a usar mais recentemente o pacote Thermo-Calc. Além das formulações matemáticas complexas, que resultam sempre em solução numérica, os cálculos necessitam de base de dados, usualmente não mostrada nos trabalhos. Somente as bases de dados de Kirkaldy et al.^{48,52}, de Uhrenius⁵⁸ e de Miettinen⁶⁵ foram encontradas na literatura consultada.

3.2.2. Condições de equilíbrio na interface durante a transformação

Existem três modos de distribuição dos elementos substitucionais na interface de transformação, e que estão relacionados à cinética de transformação⁶⁶: (a) equilíbrio completo na interface austenita/ferrita com partição de elementos substitucionais (M) e do C na ferrita e na austenita; (b) equilíbrio local na interface, mas sem haver partição de M entre a austenita e a ferrita, gerando, com isso, um pico de concentração junto à interface do lado da austenita; (c) condição em que o elemento M não particiona nem forma um pico de concentração na interface, ou seja, sua concentração é a mesma na austenita prévia e na ferrita.

Esses três modos de distribuição dos substitucionais estão esquematizados na Figura 3.10. Os modos (a) e (b) representam condições de equilíbrio, enquanto que no modo (c) o equilíbrio somente ocorre para os elementos de alta difusividade tais como o C. A condição de equilíbrio completo, mostrada em A na Figura 3.10, é chamada de **ortoequilíbrio**. Para transformações em altas temperaturas, ou seja, baixa supersaturação, a interface de transformação pode avançar com suficiente partição de M e de C, equilibrando os potenciais químicos ao longo da interface. Com isso, a transformação é controlada pela difusão de M na austenita. Em temperaturas mais baixas, isto é, em maiores supersaturações, a interface ainda pode avançar em condições de equilíbrio, mas com praticamente nenhuma partição dos elementos M entre a austenita e a ferrita. Com isso, o perfil de distribuição do elemento na austenita fica reduzido a um pico, como mostrado em B na Figura 3.10. Essa condição foi inicialmente chamada de equilíbrio local. Atualmente, tem sido muito utilizado o termo (NPLE) **equilíbrio local com partição desprezível** do soluto. Nessa condição, o crescimento da ferrita fica controlado pela difusão do C na austenita. Finalmente, o estado termodinâmico conhecido como **paraequilíbrio**, modo C na Figura 3.10, é definido para a condição em que não existe nenhuma partição de elementos substitucionais. Nesse caso, somente o potencial químico do C é equilibrado ao longo da interface, enquanto que os elementos substitucionais ficam congelados em relação aos seus teores na austenita original. A transformação fica controlada pela difusão do C.

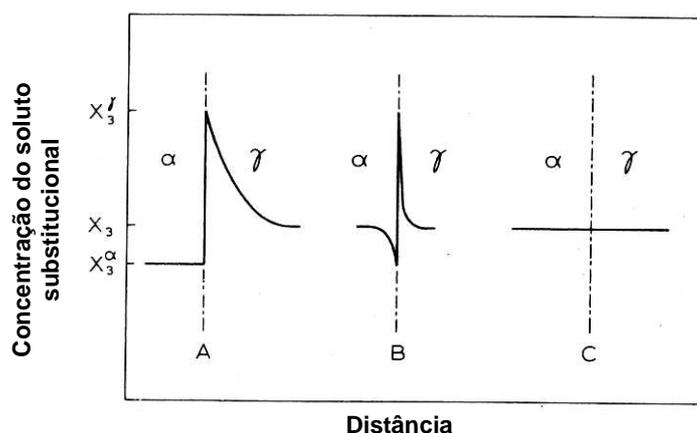


Figura 3.10 - Representação esquemática da distribuição de elementos de liga entre a austenita e a ferrita para os três modos de equilíbrio⁶⁶, A: ortoequilíbrio; B: equilíbrio local; C: paraequilíbrio.

Nas condições usuais da transformação da austenita em processos comerciais, a condição de equilíbrio pleno raramente é atingida. Existe uma grande discussão atual, com dezenas de publicações sobre o assunto, sobre qual condição prevalece em cada sistema, se paraequilíbrio ou equilíbrio local com partição desprezível. Porém, a situação é específica para cada condição, ou seja, depende da composição da liga e da temperatura de transformação. A condição de paraequilíbrio tem sido a mais utilizada no modelamento da decomposição da austenita, porém, mais recentemente, tem ganhado maior aceitação a condição de NPLE. Militzer et al.^{13,62} mostraram que os dados experimentais de temperaturas de transformação de ligas Fe-C-Mn situaram-se entre os limites daquelas calculadas para os modos paraequilíbrio e NPLE. No caso de transformação em resfriamento contínuo, a tendência seria uma maior aproximação do modo paraequilíbrio na fase inicial e transição para o modo NPLE ao final da transformação. Enomoto⁵⁰ sustenta que mesmo em condições isotérmicas, deve haver uma transição entre esses modos.

3.3 Cinética da Transformação Isotérmica

Toda a formulação teórica para a decomposição da austenita foi desenvolvida para a condição de transformação isotérmica, com destaque para o volume de publicações sobre o assunto entre aproximadamente os anos 1920 a 1970. Grande quantidade de diagramas de transformação isotérmica (descritos no próximo item) foi construída nesse período. Ainda que atualmente sejam desenvolvidos estudos relativos à transformação

em condições isotérmicas, muitos deles voltados para o modelamento, essa metodologia vem perdendo importância diante do estudo da transformação em resfriamento contínuo, especialmente em aços com baixas adições de elementos de liga.

3.3.1. Diagramas TTT

Uma maneira clássica de estudo da transformação da austenita é através da construção de diagramas de transformação em condições isotérmicas, chamados diagramas IT (transformação isotérmica) ou TTT (tempo-temperatura-transformação). A grande vantagem desse tipo de diagrama, no entendimento da transformação da austenita, é o fato de que a temperatura é mantida constante. Isso facilita muito também as formulações matemáticas. A Figura 3.11 mostra um exemplo de diagrama TTT. Para sua construção, amostras do aço em estudo são austenitizadas e resfriadas “instantaneamente” até a temperatura de transformação, onde são deixadas por tempo suficiente para esse processo. As temperaturas de início e final de transformação são determinadas por métodos metalográficos ou por análise quantitativa das curvas dilatométricas. Mais detalhes sobre este tópico são dados no item 3.7.

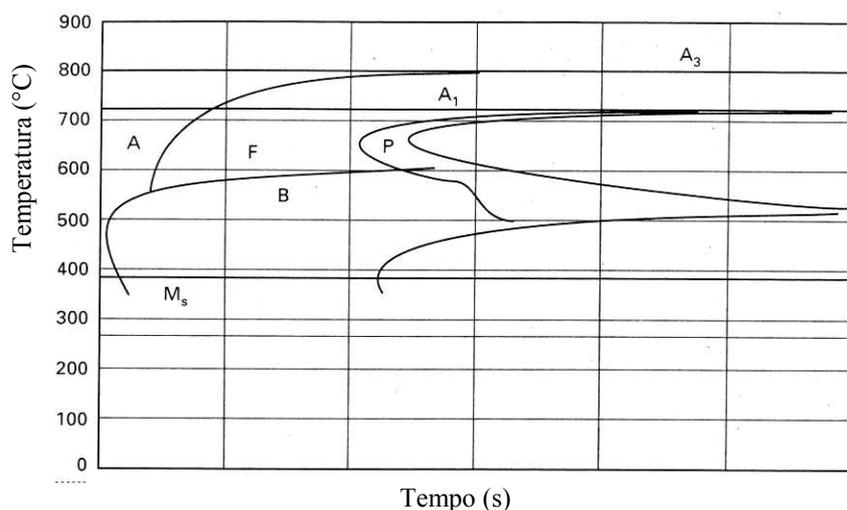


Figura 3.11 - Diagrama TTT para o aço AISI4130 contendo 0,30%C-0,64%Mn-1,0%Cr-0,24%Mo, de acordo com o *ASM Handbook*⁶⁷.

O tempo até que seja perceptível alguma transformação, mostrado no diagrama TTT como a linha de início de transformação, é chamado tempo de início de transformação. Observa-se que o tempo de início de transformação passa por um mínimo, indicando o momento em que a transformação é mais rápida. A análise do tempo de início de transformação tem sido objeto de investigação por muitos pesquisadores^{8,22,50,61,64,68-72},

focando-se na formulação de expressões para sua previsão. O trabalho pioneiro de Scheil, citado por Hawbolt et al.⁶⁹, que resultou na formulação da regra da aditividade, discutida no item 3.8.1, foi uma das importantes realizações nesse campo.

Os elementos de liga em geral aumentam o tempo de início de transformação. Portanto, os diagramas TTT são especialmente adequados para aços com média ou alta liga, uma vez que o tempo de início de transformação é bem maior que o tempo necessário para resfriar a amostra da temperatura de austenitização até aquela de transformação, tornando viável e precisa a determinação da linha delimitante do início de transformação. Em aços baixo carbono e de baixa liga o tempo de início de transformação é muito pequeno, de forma que fica difícil fazer um resfriamento rápido o suficiente até a temperatura de teste sem que haja qualquer transformação da austenita. Assim, a medição do tempo de início de transformação se torna imprecisa. Embora existam diagramas TTT para aços baixo carbono de baixa liga, sua aplicação deve ser feita com precaução devido a essas ponderações. Na verdade, para os aços modernos microligados os diagramas TTT praticamente não têm sido aplicados, em favor dos diagramas em resfriamento contínuo (discutido no item 3.4).

Sabendo-se que a taxa de resfriamento até a temperatura de transformação é um valor finito, o qual depende do aço e das condições do equipamento de teste, os diagramas TTT publicados não são absolutos. Esse aspecto é tanto mais relevante quanto menores as adições ao aço. Neste sentido, Pham et al.^{70,73} utilizaram o conceito de diagrama TTT ‘real’, que seria um diagrama absoluto e independente da taxa de resfriamento obtida. Todos os diagramas existentes deveriam ser corrigidos de acordo com o diagrama ‘real’. Na mesma linha de raciocínio, Wierszyllowski⁷⁴ estabeleceu o conceito e a formulação para calcular o diagrama TTT ‘ideal’. Pan²² utilizou estes dois conceitos e fez as correções de seus diagramas TTT obtidos, para aços CMn, ao modelar a cinética de transformação isotérmica.

Um outro aspecto interessante a ser comentado sobre os diagramas TTT diz respeito à separação das curvas para as diferentes constituintes formadas, particularmente entre a perlita e a bainita. Alguns elementos químicos adicionados aos aços, tais como Mo, têm a propriedade de separar as faixas de temperatura de formação da perlita e da bainita. Com isso, pode-se distinguir mais facilmente as curvas no digrama TTT de formação

desses constituintes. Na maioria das vezes, porém, os campos de formação da perlita e da bainita estão sobrepostos, o que leva ao traçado de uma só curva para o início de transformação para os dois constituintes. Esse aspecto foi considerado no trabalho de Fang et al.⁷², que estudaram a decomposição isotérmica da austenita em um aço CMn com adições de Cr, Ni e Mo. Os autores desenvolveram uma metodologia para separar, no diagrama TTT, as regiões da formação das fases ferrita, perlita e bainita, conforme mostra a Figura 3.12.

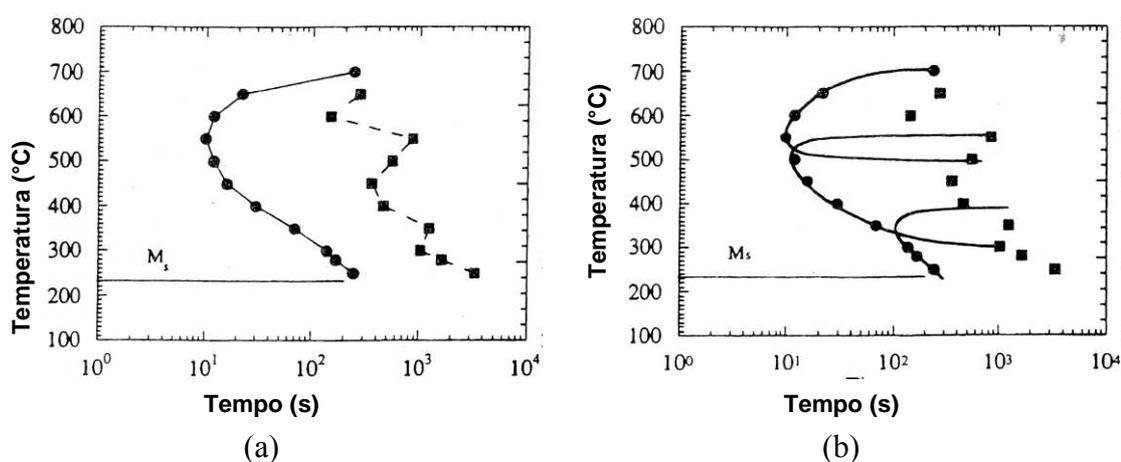


Figura 3.12 - Diagrama TTT de um aço 0,69%C-0,44%Mn-0,24%Si-0,45%Cr-0,8%Ni-0,12%Mo medido em (a), e limites superior e inferior de transformação em (b), estabelecidos por Fang et al.⁷².

3.3.2. Cinética de nucleação

A cinética de nucleação de uma nova fase em meio a uma matriz foi bastante estudada, teórica e experimentalmente, destacando-se os trabalhos de Russel⁷⁵ e de Aaronson e colaboradores⁷⁶⁻⁷⁷. Baseando-se nos conceitos originais de Wolmer, Weber, Becker e Döring, foi estabelecida a equação geral para a taxa de nucleação dependente do tempo, J , equação (3.1). Nesta equação, z é o fator de não-equilíbrio de Zeldovich; β^* é o fator de frequência; N é o número de sítios atômicos de nucleação; ΔG^* é a energia livre de formação de um núcleo; k a constante de Boltzmann e τ o tempo de início de transformação.

$$J = z\beta^* N \exp(-\Delta G^* / kT) \exp(-\tau / t) \quad (3.1)$$

A dedução da equação (3.1) depende da geometria do núcleo da nova fase, que pode assumir diversas configurações⁷⁶ conforme o balanço das energias de deformação e de criação das novas interfaces. Lange et al.⁷⁶ propuseram que a formação de um núcleo coerente do tipo *pill box*, Figura 3.13, minimiza a distorção da rede. Por isso, esse tipo de modelo de núcleo é o que tem sido mais adotado em outros estudos^{14,22,78-79}. A taxa de nucleação para esse núcleo, de acordo com Lange et al.⁷⁶, fica dada pela expressão (3.2).

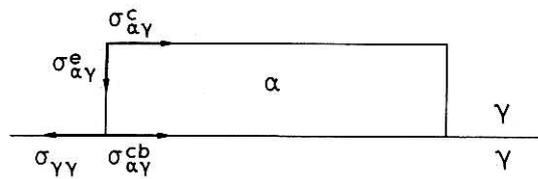


Figura 3.13 - Geometria de núcleo coerente tipo *pill box*, proposto por Lange et al.⁷⁶.

$$J = N \frac{2Dx_{\gamma} V_{\alpha} \varepsilon^{0,5}}{a^4 (3kT)^{0,5}} \exp \left[- \frac{4\pi(\sigma_{\alpha\gamma}^e)^2}{\Delta G^* kT} \right] \exp(-\tau/t) \quad (3.2)$$

$$\tau = \frac{12kT\sigma_{\alpha\gamma}^e a^4}{Dx_{\gamma} V_{\alpha}^2 (\Delta G_V)^2}; \quad \varepsilon = \sigma_{\alpha\gamma}^c + \sigma_{\alpha\gamma}^{cb} - \sigma_{\gamma\gamma} \quad (3.3)$$

Nas equações (3.2) e (3.3): D é a difusividade do elemento considerado na matriz; x_{γ} a concentração do soluto na matriz antes da transformação; V_{α} o volume atômico no núcleo (considerado de ferrita); a o parâmetro de rede, normalmente a média entre as duas fases; e ΔG_V : força motriz para formação da nova fase.

Observa-se que as expressões para o modelamento da nucleação por princípios teóricos são demasiadamente complexas, além de envolver um grande número de parâmetros cuja determinação não é precisa. Por isso, no modelamento da transformação da austenita, este tipo de tratamento não tem tido aplicação.

Formas mais simplificadas para descrever a taxa de nucleação têm sido, às vezes, utilizadas no modelamento da transformação. Uma dessas formas se refere a modelar, ao invés da taxa, o tempo de início de transformação. Pan²² fez uma análise da

aplicabilidade de diversas equações para o tempo de início de transformação, comparando valores previstos com medidos, e concluiu que a melhor expressão foi a de Pham et al.^{70,73}, dada em (3.4). Interessante que, entre as expressões analisadas, esta era a mais simples e a única que não envolvia o termo de variação de energia livre.

$$\tau = k_1 \frac{\exp(Q_D / RT)}{(\Delta T)^{4,5}} \quad (3.4)$$

Nesta equação, k_1 é um parâmetro constante; Q_D a energia de ativação para difusão do C na austenita; e ΔT é o super-resfriamento abaixo de Ae_3 .

Nos trabalhos sobre modelamento da transformação da austenita desenvolvidos por pesquisadores japoneses, especialmente Suehiro^{6,7,80-84} e Yoshie⁸⁵, foram usadas expressões semi-empíricas para cálculo da taxa de nucleação, da forma mostrada na equação (3.5). Os principais parâmetros mensuráveis com precisão e que influem na transformação foram mantidos das equações básicas de nucleação. Foram introduzidos parâmetros determinados experimentalmente através de valores da cinética de transformação para compensar os efeitos do número de sítios para nucleação, parâmetro k_1 , e relativo à energia de superfície, parâmetro k_2 . Esse tipo de formulação foi utilizado posteriormente por outros pesquisadores japoneses^{5,86-87} no desenvolvimento de modelos de transformação.

$$J = k_1 T^{-0,5} D \exp\left(-\frac{k_2}{RT\Delta G_v^2}\right) \quad (3.5)$$

3.3.3. Cinética de crescimento

Uma expressão matemática para a velocidade de crescimento da frente de uma nova fase, quando a transformação é controlada por difusão, foi proposta originalmente por Zener²⁸. Esta expressão representa uma forma de crescimento parabólico com o tempo, conforme expressão (3.6), sendo R: raio do grão de ferrita em crescimento; e a parâmetro dependente das concentrações na interface e da difusividade do soluto na matriz.

$$R = a\sqrt{t} \quad (3.6)$$

Fazendo-se a simplificação suposta por Zener de que o gradiente de concentração à frente da interface de transformação seja linear, o parâmetro a fica dado pela equação (3.7), que é, portanto, a forma mais simples para este parâmetro. O parâmetro k_3 não faz parte da solução analítica para a , mas foi introduzido apenas para ajustar dados experimentais aos medidos. D_C é o coeficiente de difusão do C na austenita.

$$a = \frac{k_3 \sqrt{D_C} (C_\gamma - C_0)}{(C_\gamma - C_\alpha)^{0,5} (C_0 - C_\alpha)^{0,5}} \quad (3.7)$$

É possível deduzir a solução analítica exata para a equação de difusão do C na austenita⁶⁴, o que leva a uma formulação mais complexa para o valor de a . De qualquer forma, para as concentrações C_α e C_γ são necessários cálculos termodinâmicos e seus valores dependem da partição dos elementos durante a transformação, ou seja, da condição de equilíbrio na interface. Rigorosamente, a equação (3.7), ou a solução exata analítica, não são válidas ao final da transformação, quando ocorre superposição dos campos de difusão de C na austenita (*soft impingement*).

Em diversos trabalhos subsequentes ao de Zener, Hillert^{29,30} adaptou a equação deste autor para tratar diversos aspectos não considerados, tais como tipos de crescimento, frontal (*edgewise*) ou lateral (*sidewise*), efeitos de capilaridade e de curvatura do núcleo. O tipo de equação obtida para a velocidade de crescimento da nova fase ficou conhecido com equação de Zener-Hillert, a qual estabelece que a velocidade de avanço da interface ocorre para uma curvatura tal do núcleo que maximize essa velocidade. Kafuman et al³¹. desenvolveram algoritmos para solução numérica dessa equação, dada em (3.8), para o crescimento da bainita, sendo r o raio da ponta da ripa em crescimento e $C_{\gamma\alpha}$ a concentração de C na austenita junto à interface.

$$G = \frac{1}{2r} D_C \frac{C_{\gamma\alpha} - C_\gamma}{C_\gamma - C_\alpha} \quad (3.8)$$

Utilizando-se a metodologia de Kaufman et al.³¹, o presente autor reproduziu, através do desenvolvimento de uma rotina computacional, o cálculo da velocidade de crescimento da bainita, como mostra a Figura 3.14.

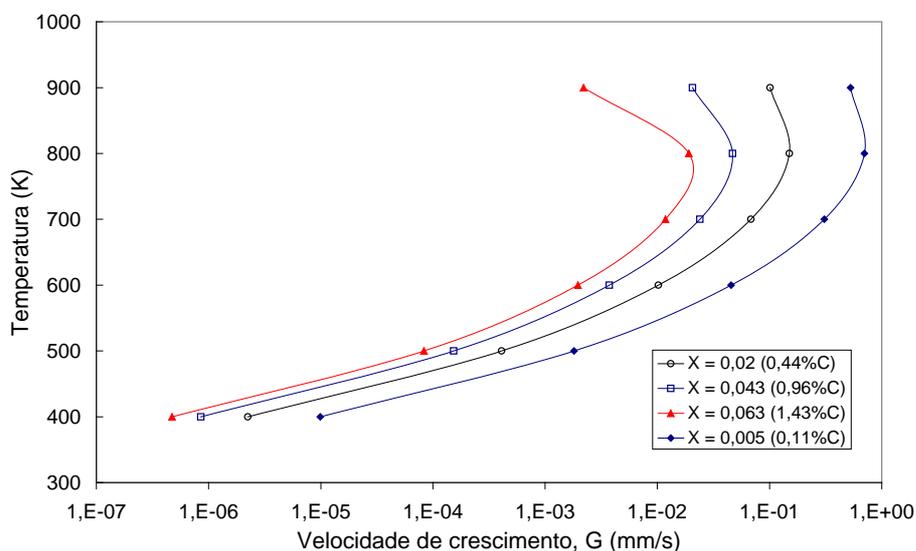


Figura 3.14 - Velocidade de crescimento da bainita a partir da decomposição isotérmica da austenita, de acordo com as formulações de Kaufman et al.³¹, para ligas Fe-C com diferentes teores de C. X é a fração molar de C na austenita.

A equação de Zener-Hillert, na forma adaptada de Kaufman et al., foi utilizada por Suehiro e colaboradores^{6,7,80-84}, no desenvolvimento de seus modelos de transformação da austenita em ferrita e perlita.

A aplicação das equações (3.7) ou (3.8) para modelamento da transformação da austenita requer o desenvolvimento de um modelo geométrico, que relacione o avanço da interface com a evolução da fração transformada. É necessário estabelecer uma geometria para os grãos da austenita original, para o tipo de interface, por exemplo planar ou esférica, e para os núcleos da nova fase. A melhor geometria para a austenita é a figura do tetracadeaedro, enquanto que a formação da ferrita normalmente tem sido feita por núcleos esféricos. Detalhes sobre a formulação para a conversão da velocidade de avanço da interface em fração formada da nova fase não são encontrados na literatura, exceto duas equações básicas apresentadas por Qiu et al.⁵⁹.

3.3.4. Equação do tipo Avrami

Johnson e Mehl, citados por Verhoefen⁸⁹, mostraram que a fração transformada em uma reação isotérmica onde as taxas de nucleação, J, e de crescimento, G, são constantes e a nucleação é homogênea, pode ser representada pela equação (3.9), onde X é a fração transformada e t o tempo de transformação.

$$X = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3} JG^3 t^4\right) \quad (3.9)$$

Kolmogorov⁹⁰, de forma independente e ao mesmo tempo que Johnson-Mehl, usando deduções puramente estatísticas, chegou a uma expressão do tipo (3.10) para a fração transformada em condições isotérmicas, sendo b e n constantes.

$$X = 1 - \exp(-bt^n) \quad (3.10)$$

Na mesma época, Avrami, citado por Fang et al.⁷², considerou que a nucleação ocorria somente em alguns locais preferenciais e que a taxa de nucleação decresce com o tempo, de acordo com um fator de decaimento ν , obtendo uma expressão do tipo (3.11), sendo: N_0 , número de locais de nucleação por unidade de volume; η , fator de forma; Y_1 , Y_2 e Y_3 , velocidades de crescimento nas três direções ortogonais.

$$X = 1 - \exp\left\{-6\eta Y_1 Y_2 Y_3 N_0 / (\nu)^3 \left[\exp(-\nu t) + \nu t + \frac{\nu^2 t^2}{2} + \frac{\nu^3 t^3}{6} \right]\right\} \quad (3.11)$$

Pode-se mostrar que a equação (3.11) se reduz à equação (3.10), com $n=3$ para t muito grande, ou com $n=4$ para t muito pequeno. Isso significa que as equações (3.9), (3.10) e (3.11) podem ser consideradas idênticas, para certas condições dos termos usados. Existem algumas denominações para a equação (3.10), como equação JMAK, mas a mais conhecida, e usada doravante, é equação tipo Avrami.

Cahn⁹¹, utilizando o conceito de volume estendido, proposto originalmente por Avrami, e considerando os mecanismos de nucleação e crescimento para a formação da nova fase, deduziu equações teóricas gerais para a cinética de decomposição da austenita. A forma da austenita foi admitida como um tetracadaedro e a fase formada foi considerada esférica. De uma forma simplificada, o conceito de volume estendido pode ser traduzido pelo seguinte raciocínio. Durante a transformação, os núcleos formados crescem até que suas superfícies atinjam outros grãos, o que é chamado de *hard impingement*. No local onde já se formou o grão da nova fase não há como formar novo núcleo. O conceito de volume estendido significa o volume imaginário adicional que seria obtido caso os núcleos continuassem a crescer indefinidamente e a velocidade de nucleação se mantivesse constante ao longo de todo tempo, tanto na região não transformada quanto na transformada, como se novos grãos pudessem se sobrepor àqueles já formados. A equação (3.12) fornece a relação entre a fração volumétrica transformada, X , e a fração devida ao volume estendido, X_e , sendo que esta última pode ser maior que a unidade.

$$X = 1 - \exp(-X_e) \quad (3.12)$$

Nas deduções de Cahn⁹¹, as velocidades de nucleação e de crescimento foram consideradas constantes. A nucleação de uma nova fase na austenita ocorre preferencialmente nos contornos de grão da austenita, mas existem três tipos de locais (sítios de nucleação), que podem ser mais ou menos ativos: superfícies do grão, arestas do grão e pontos tríplices. A título de exemplo, a equação (3.13) foi obtida por Cahn⁹¹ para o caso de nucleação na superfície do grão austenítico. Equações semelhantes a essa foram obtidas para os dois outros locais de nucleação.

$$X = 1 - \exp[-b_s \cdot f_s(a_s)] \quad (3.13)$$

$$a_s = (J_s G^2)^{1/3} t \quad b_s = \frac{N_s}{8S^4 G}$$

$$f_s(a_s) = \int_0^1 \left[1 - \exp\left(-\pi a_s^3 \left(\frac{1-x^3}{3} - x^2(1-x)\right)\right) \right] dx$$

G: velocidade de crescimento da nova fase;

J_s : frequência de nucleação por unidade de superfície do grão;

N_s : frequência de nucleação por unidade de volume;

S : área do contorno de grão.

Comparando-se a equação (3.10) com a (3.13), nota-se que o parâmetro b depende de fatores geométricos e das velocidades de nucleação e de crescimento.

O parâmetro n depende do sítio de nucleação preferencial, ou seja, se a transformação se dá predominantemente por nucleação na superfície, nas arestas ou nos pontos tríplices originais, conforme apontado por Cahn⁹¹.

Seguindo ainda o desenvolvimento de Cahn⁹¹, quando o valor de a_s é pequeno, implica que todas as equações de fração transformada tendem para a relação dada em (3.9), independente do sítio preferencial de nucleação. Esta equação é a mesma obtida quando se considera a nucleação ocorrendo de forma aleatória em todo o volume, incluindo-se o interior do grão.

Para valores de b_s muito altos, a velocidade de nucleação é elevada em relação à velocidade de crescimento, o que leva a uma condição em que todos os locais de nucleação ficam preenchidos bem no início da reação, de forma que a transformação fica controlada apenas pela velocidade de crescimento. Esta condição é chamada de saturação de sítios (*site saturation*). Nesta condição, a equação (3.13) reduz-se à forma mostrada em (3.14), para o caso de nucleação predominante na superfície do grão⁹¹.

$$X = 1 - \exp(-2SG.t) \quad (3.14)$$

No caso de saturação de sítios com nucleação predominante nas arestas⁹¹, a cinética de transformação fica dada por (3.15).

$$X = 1 - \exp(-\pi LG^2.t^2) \quad (3.15)$$

L : comprimento de aresta por unidade de volume.

Finalmente, no caso de saturação de sítios com nucleação predominante nos pontos tríplexes⁹¹, a cinética de transformação fica dada por (3.16).

$$X = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3}CG^3 \cdot t^3\right) \quad (3.16)$$

C: número de pontos tríplexes por unidade de volume.

Observa-se nas equações (3.13-3.16) que, teoricamente, a determinação da dependência funcional da fração transformada com o tempo indica o tipo de sítio preferencial de nucleação, no caso de saturação de sítios.

As equações (3.14 a 3.16) foram deduzidas para a condição de saturação de sítios da transformação. Quando as taxas de nucleação e crescimento são significativas ao longo de toda a transformação, considera-se que a reação seja por ‘nucleação e crescimento’, sendo aplicáveis as equações gerais (3.9) a (3.11) e (3.13).

Um dos parâmetros que influenciam na cinética de transformação é o tamanho de grão prévio da austenita. Nas equações de (3.13) a (3.16), o seu efeito está indiretamente considerado através das velocidades de nucleação e crescimento. Para incorporar este efeito na equação de Avrami, Tamura⁹² propôs uma equação modificada, dada em (3.17), sendo que os valores das constantes m e n são dados na Tabela 3.1. d_γ é o tamanho de grão austenítico.

$$X = 1 - \exp\left[-b \frac{t^n}{d_\gamma^m}\right] \quad (3.17)$$

Tabela 3.1 - Valores de m e n para várias condições de transformação de acordo com Tamura⁹².

Mecanismo	Saturação de sítios		Nucleação e crescimento		
	Sítio	n	m	n	m
Superfície do grão		1	1	4	1
Aresta do grão		2	2	4	2
Ponto tríplex		3	3	4	3

Para a transformação da austenita em ferrita, perlita e bainita, Tamura⁹² propõe valores de m e n conforme a Tabela 3.2, indicando o modo de transformação predominante. Porém, esse autor cita que, embora a transformação austenita/ferrita seja considerada por saturação de sítios, na verdade o que ocorre é a formação de um grande número de núcleos logo no início da transformação, não havendo a saturação de sítios específicos e que, às vezes, o tipo de sítio de saturação depende do grau de super-resfriamento imposto.

Tabela 3.2 - Valores de m e n para os vários modos de transformação da austenita, de acordo com Tamura⁹².

Transformação	n	m	Nucleação	Mecanismo
Perlita	4	2	Nucleação na aresta	Nucleação e crescimento
Ferrita	1	1	Nucleação na superfície	Saturação de sítios
Bainita	4	0,61	Contorno e dentro do grão	Nucleação e crescimento

3.4 Transformação em Resfriamento Contínuo

Apesar de largamente predominantes nos processos comerciais, as transformações em resfriamento contínuo são muito menos entendidas em termos de mecanismos envolvidos e, portanto, de formulações matemáticas. A respeito do desenvolvimento de modelos matemáticos para a decomposição da austenita em resfriamento contínuo, são apresentados detalhes de várias formulações utilizadas na literatura no item 3.8.

3.4.1. Diagramas CCT

Os diagramas de transformação em resfriamento contínuo são muito úteis e têm sido largamente utilizados para estudo da decomposição da austenita. Existem compêndios de publicações de diagramas CCT realizados por diversos institutos de pesquisa. A disposição usual, embora não única, desse diagrama é mostrada como exemplo na Figura 3.15. A taxa de resfriamento do corpo-de-prova é mantida aproximadamente constante durante a transformação. O diagrama mostra as temperaturas de início e de final de transformação e, eventualmente, temperaturas para formação de frações específicas das fases/constituintes. A condição inicial da austenita é normalmente recristalizada, mas com o uso de equipamentos tais como dilatômetros de deformação e

do simulador Gleeble, é possível traçar diagramas CCT partindo-se de uma austenita na condição deformada.

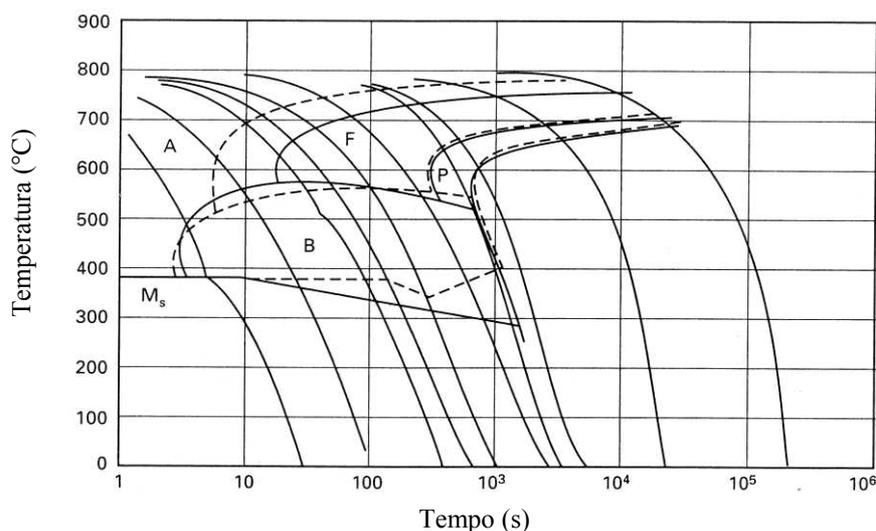


Figura 3.15 - Diagrama CCT para o aço AISI4130 contendo 0,30%C-0,64%Mn-1,0%Cr-0,24%Mo, de acordo com o *ASM Handbook*⁶⁷.

Os diagramas CCT são muito úteis para o entendimento da decomposição da austenita e caracterização da microestrutura final formada, porém não fornecem toda a cinética de transformação. Além disso, têm ainda a limitação de que cada diagrama somente é válido para a condição inicial da austenita no ensaio.

3.4.2. Seqüência de formação das fases

A maioria dos modelos de transformação global da austenita em resfriamento contínuo, por exemplo nas referências [6],[7],[13],[61],[65],[85],[88], supõe a formação seqüencial de constituintes, na ordem ferrita proeutetóide, perlita, bainita e martensita, os dois últimos se o resfriamento for suficientemente rápido. É necessário estabelecer critérios adequados para separar as faixas de formação destes constituintes. Este procedimento é altamente interessante, pois permite que cada constituintes seja tratado separadamente. Na verdade, é possível que haja alguma sobreposição de formação de alguns constituintes, porém o desenvolvimento de modelos contemplando a formação simultânea de diversos constituintes, proposto por Jones e Bhadeshia⁹³, parece não ser atraente devido à complexidade envolvida.

A Figura 3.16 mostra um fluxograma ilustrativo para o modelamento da transformação seqüencial da austenita em ferrita, perlita e bainita, onde o critério para separação entre

as fases formadas é o atingimento das temperaturas específicas para cada uma delas. Ressalta-se que os critérios colocados nessa figura para separação da formação dos constituintes não podem ser tomados como gerais. Existem vários critérios específicos que podem ser aplicados, e que serão fornecidos em mais detalhes no item 3.8.

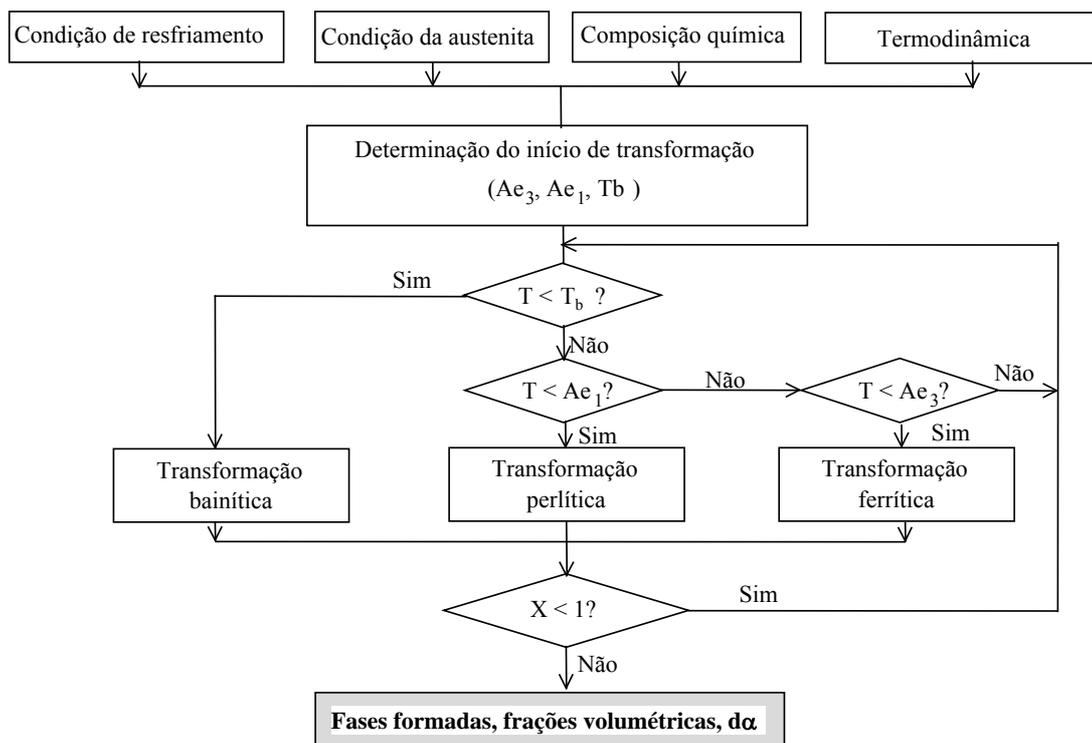


Figura 3.16 - Esquema de modelamento global da decomposição para formação sequencial das fases ferrita, perlita e bainita⁹⁴.

3.5 Transformação em Resfriamento Contínuo de Aços de Alta Resistência Microligados ao Nb

A decomposição da austenita em resfriamento contínuo depende, além da termodinâmica, de três fatores: (i) composição química do aço; (ii) condição microestrutural prévia da austenita; (iii) condições de resfriamento.

É interessante destacar que, na metalurgia, geralmente os efeitos das variáveis são não lineares, além de existirem interações entre eles, o que se aplica para a transformação da austenita. Além disso, cada fator básico citado acima se desdobra em vários outros, havendo interação entre todos eles. Dessa forma, percebe-se a complexidade do

entendimento global dos efeitos das variáveis e dos mecanismos pertinentes e, conseqüentemente, do modelamento da transformação.

Com relação ao efeito da composição química na transformação da austenita de aços convencionais, dois grandes grupos podem ser separados: os aços CMn e os microligados ao Nb. Na verdade, é difícil falar do efeito de cada um dos três fatores acima de forma isolada, devido à interação entre eles. Mas, para efeito de divisão das idéias, são colocados sub-itens para cada um de tais efeitos. Adicionalmente, é colocado um item especial para tratar do efeito do Nb, que é o elemento químico mais relevante para o propósito do presente estudo.

Na condição usual de laminação de tiras a quente, todos os passes de laminação ocorrem enquanto o material está na fase austenítica. Na laminação controlada de chapas grossas de aços microligados, é comum parte dos passes serem aplicados na região bifásica, onde coexistem austenita mais ferrita, visando endurecimento por deformação dessa última. Na laminação de tiras a quente de alguns aços, tais como os de aplicação para fins elétricos, é possível ocorrer alguns passes nas regiões interfásica ou ferrítica⁹⁵. O objetivo do presente estudo exclui essas duas formas de laminação, de modo que a transformação será sempre considerada a partir de uma microestrutura totalmente austenítica.

Evidentemente, modelos de transformação para chapas grossas laminadas na região bifásica precisam considerar a nucleação das novas fases, normalmente a ferrita, enquanto o material está sendo deformado⁶¹. Também na área de laminação de tiras a quente tem sido estudada a transformação da austenita, sob a aplicação de uma tensão, visando obtenção de um grão ferrítico ultrafino (da ordem de 1 μm a 3 μm), sendo esta chamada de transformação induzida por deformação⁹⁶⁻⁹⁷.

3.5.1. Efeito da composição química

O efeito dos elementos químicos presentes nos aços na transformação da austenita tem sido bastante estudado ao longo de décadas, existindo uma vasta literatura a respeito^{23,24,26,38,51}. No entanto, na maioria das vezes, as condições dos estudos são específicas, não aplicáveis diretamente ao caso de aços microligados de alta resistência

laminados a quente. Portanto, o objetivo desse tópico é apenas fornecer tendências gerais.

Entre os elementos de solução sólida intersticial, o C é de longe o elemento mais importante para a transformação da austenita. De forma qualitativa, seu efeito pode ser interpretado a partir do diagrama de equilíbrio de fases Fe-C. Na verdade, entre os intersticiais somente este elemento tem sido considerado em modelos de transformação da austenita. Porém, o N pode também influenciar de forma indireta na transformação. Por exemplo, sua combinação com os elementos formadores de nitretos e carbonitretos, tais como Nb, V, Ti e B, influi na quantidade desses elementos em solução sólida na austenita, alterando a forma e extensão de sua influência na transformação.

De uma forma muito genérica, o aumento do teor de C diminui as temperaturas de transformação, alterando os produtos formados. Porém, seu efeito precisa ser estudado para cada composição química, relativamente à presença de outros elementos químicos na liga e ao processamento termomecânico prévio à transformação.

Entre os elementos de solução sólida substitucional, o Mn tem sido o mais estudado, através de ligas Fe-C-Mn. Novamente, é colocada a questão da interação entre os elementos químicos na transformação de fases, pois o efeito deste elemento depende de outras condições. No entanto, já foi bem estabelecido a partir de diversos estudos^{23,26} que o Mn retarda o início e a cinética de transformação da austenita. O abaixamento na temperatura de início de transformação para a ferrita é explicado pelo efeito do Mn em ampliar o campo de estabilidade da austenita. Com isso, as temperaturas de início de transformação são mais baixas, favorecendo a formação de constituintes fora do equilíbrio, com estruturas aciculares. Adicionalmente, o Mn tende a se concentrar na interface de reação austenita/ferrita, diminuindo a velocidade de transformação pelo efeito de arraste de soluto^{23,53-55}.

Tais considerações sobre o efeito do Mn se referem à transformação difusional austenita→ferrita. Para a formação de produtos de baixa temperatura, onde podem prevalecer mecanismos adifusionais, o efeito do Mn não pode ser explicado de uma forma simples assim. Nesse ponto, abre-se o leque para uma discussão ampla e que ainda está em debate, sobre quais elementos e em que condições, difundem ou não

durante a transformação. Igualmente importante e ainda controverso, é o entendimento de quais produtos de transformação ocorrem por difusão ou por mecanismos de cisalhamento de rede.

Além do efeito na transformação em si, e de suas interações com outros elementos químicos, um outro efeito indireto do Mn na transformação de aços microligados é através de sua influência na precipitação de carbonitretos durante o processamento termomecânico da austenita. Foi mostrado que o Mn retarda a cinética de precipitação de carbonitretos na austenita⁹⁸, o que é explicado por seu efeito em diminuir a atividade do C nessa fase. Em conseqüência, maior quantidade de Nb estará em solução sólida antes da transformação para ferrita.

O aços de alta resistência e baixa liga de baixo teor de C são normalmente acalmados ao Al e Si, de forma que este último elemento encontra-se presente, via de regra, em teores de até 0,30%. Nesses níveis, seu efeito direto na transformação da austenita não é dos mais significativos. A tendência do Si é retardar a transformação, por efeito de arraste de soluto, e dificultar a formação da cementita. Seu efeito durante o processamento termomecânico é contrário ao do Mn, ou seja, o Si tende a acelerar a precipitação de carbonitretos na austenita⁹⁹, diminuindo a quantidade de Nb em solução sólida antes da transformação.

Os demais elementos substitucionais utilizados nos aços de alta resistência são o Mo, Cr, Ni e Cu. Especialmente os dois primeiros aumentam muito a temperabilidade dos aços, favorecendo a formação não somente de martensita, mas também de outros constituintes fora do equilíbrio, tais como a bainita e as diferentes morfologias de ferrita não poligonal. Estudos específicos da transformação da austenita em ligas Fe-C-M, sendo M um dos elementos citados, são encontrados na literatura, com ênfase nos aspectos termodinâmicos da transformação^{18,24,45}. A intensidade do efeito de cada elemento depende, entretanto, dos teores dos outros elementos e das condições do tratamento termomecânico. De uma forma geral, a tendência destes elementos é de abaixar a temperatura de transformação, portanto retardar a nucleação da ferrita, e diminuir a velocidade de crescimento da nova fase, pelo efeito de arraste de soluto.

Um elemento de especial interesse em aços microligados é o B, que favorece a formação de bainita. O B segrega no contorno de grão austenítico e, por efeito sinérgico com o Nb, dificulta as transformações difusionais, levando, invariavelmente, à formação de constituintes de baixa temperatura nos aços^{38,100}. Novamente, o efeito do B depende dos teores dos outros elementos, especialmente dos fixadores de N, tais como Ti e Al, que podem deixar o B livre de modo a segregar no contorno de grão.

Sobre os elementos residuais dos aços, P, S e O, não tem havido relatos sobre suas influências na transformação da austenita, considerando-se os baixos teores admissíveis nos aços microligados. Entretanto, eles podem ter um efeito indireto através da geração de sítios favoráveis para nucleação intragranular da ferrita^{64,101-102} (nucleação heterogênea). A nucleação da ferrita ocorre nos contornos de grão da austenita, sendo os pontos tríplexes os locais preferenciais, seguidos das arestas e das faces. Quando a austenita encontra-se deformada, sítios intragranulares chamados defeitos planares, tais como bandas de deslizamento e maclas, podem também constituir locais de nucleação. Se a transformação parte de um grão austenítico recristalizado pequeno, a contribuição da nucleação intragranular é praticamente desprezível. Se o grão está deformado, a possível nucleação intragranular não necessita da presença de inclusões. Porém, quando a transformação ocorre a partir de um grão austenítico grande recristalizado, as inclusões do material exercem papel importante na nucleação da ferrita^{64,103-104}. Aplicando-se esses conceitos para a laminação de tiras a quente de aços microligados, conclui-se que a influência das inclusões na transformação da austenita deve ser desprezível, uma vez que o grão estará deformado ou recristalizado, estaticamente ou dinamicamente, e pequeno.

Os elementos de microliga Nb, V e Ti são fundamentais para a obtenção das propriedades mecânicas dos aços de alta resistência. O Nb, por sua maior relevância para o processamento desses aços, será tratado separadamente. O V exerce efeito de arraste de soluto¹⁰³, diminuindo a velocidade de formação da ferrita, mas seu efeito é significativamente menor que o do Nb. O Ti é adicionado aos aços microligados de alta resistência visando, principalmente, controle da tenacidade do material na região da solda, através do controle do crescimento de grão. Adicionalmente, ele exerce o efeito

de endurecimento por precipitação na ferrita. O efeito direto do Ti na transformação da austenita não tem sido relatado na literatura.

3.5.2. Efeito da microestrutura da austenita prévia

A condição microestrutural da austenita antes da transformação é caracterizada por: (i) estrutura recristalizada ou encruada; (ii) tamanho de grão austenítico; (iii) quantidade de defeitos planares, tais como bandas de deformação e maclas; (iv) distribuição de precipitados e elementos químicos em solução sólida.

Quando a austenita está encruada, é comum utilizar-se o parâmetro S_v , dado pela área total disponível para nucleação da ferrita por unidade de volume, para descrever o estado microestrutural¹⁰⁴. Nesse parâmetro estão incluídas as parcelas relativas aos contornos de grão da austenita e dos defeitos planares¹⁰⁵. Se a austenita encontra-se recristalizada, tal parâmetro ainda pode ser usado, sendo calculado por relações simples a partir do tamanho de grão austenítico recristalizado^{6,84-85,92}. Portanto, S_v pode ser usado como uma variável independente no estudo da transformação da austenita, abrangendo os efeitos citados nos itens (i), (ii) e (iii) no parágrafo anterior.

Uma forma alternativa, e ainda mais simples, de estudar o efeito dessas variáveis é considerar a quantidade de deformação na austenita, normalmente chamada deformação retida ou deformação residual. Esse nome deriva do processo de laminação, onde parte da deformação total aplicada na etapa de laminação de acabamento fica retida na estrutura, devido à não recristalização completa do material. Nesse caso, são considerados diretamente os efeitos do tamanho de grão austenítico e da deformação aplicada na região de não-recristalização, esta última sendo válida se não ocorrer amaciamento significativo entre o final da deformação e o início da transformação. Essa abordagem é válida, uma vez que a quantidade de defeitos planares na austenita encruada é proporcional à deformação residual¹⁰⁵.

A influência da distribuição de precipitados e de elementos em solução sólida na transformação da austenita tem sido tratada na literatura indiretamente através das condições de encharque dos corpos-de-prova e do tratamento termomecânico^{6,13,55,56,80,106}, uma vez que análises tanto teóricas quanto determinações experimentais esbarram em problemas de precisão e de dificuldades de execução.

Assim, para uma dada composição química e uma rota de processamento termomecânico, a condição prévia da austenita pode ser considerada, de forma direta e simples nos modelos de transformação, pela quantidade de deformação e pelo tamanho de grão austenítico. Estes dois parâmetros determinam, sobremaneira, a cinética de transformação da austenita e os produtos de transformação em aços microligados. Deve-se destacar que existe uma interação entre esses parâmetros, e ainda entre eles e a taxa de resfriamento.

É interessante ainda observar que estudos fundamentais sobre a influência da deformação da austenita na cinética de transformação têm sido realizados em aços CMn¹⁰⁷, para bloquear o efeito do Nb. Entretanto, para o contexto proposto no presente estudo, toda a discussão apresentada refere-se ao efeito da condição prévia da austenita em aços microligados ao Nb. Nesses aços, o efeito da deformação da austenita tem sido objeto de numerosos estudos^{5,39,87-89,108-114}. Por outro lado, o efeito do tamanho de grão inicial tem sido menos estudado^{38,40,111-113}.

O aumento do tamanho de grão austenítico desloca a transformação para temperaturas mais baixas, resultado de uma menor taxa de nucleação devido ao menor valor de S_v . Também a cinética de transformação, que pode ser avaliada pelo tempo necessário para a transformação se completar, torna-se mais lenta com o tamanho de grão austenítico nas transformações difusionais, uma vez que as distâncias de difusão são maiores. Portanto, o aumento do grão austenítico diminui tanto a taxa de nucleação quanto a velocidade de crescimento¹⁶. A ferrita, que normalmente nucleia no contorno de grão, sendo chamada ferrita alotriomórfica, passa a nuclear também no seu interior, sendo chamada de ferrita idiomórfica, se o grão austenítico for muito grande^{64,101-102}.

O efeito da deformação retida na austenita é mais complexo que o do tamanho de grão. Tamura⁹² postulou que a deformação aumenta os locais de nucleação da ferrita por três razões: (i) aumento da área de contorno de grão da austenita pela deformação, sendo um efeito geométrico; (ii) criação de *ledges* no contorno aumentando seu potencial para nucleação; (iii) formação de defeitos planares intragranulares, tais como bandas de deformação. A nucleação intragranular tem sido observada por diversos pesquisadores^{41,92,107}, porém Khlestov et al.¹¹⁰, através de observações experimentais e cálculos da taxa de nucleação, mostraram que ela não é significativa. Nesse caso, o

aumento da taxa de nucleação observado experimentalmente seria devido ao aumento do potencial de nucleação no contorno, ou seja, em razão da proposição (ii) de Tamura. A nucleação intragranular somente seria significativa no caso de grãos muito grandes.

O efeito observado do aumento da taxa de nucleação com a deformação da austenita resulta em temperaturas de início de transformação mais altas, comparando-se com material não deformado. Porém, o efeito da deformação na cinética de transformação não é claro. Manohar et al.¹⁰⁸ verificaram um ligeiro aumento do tempo de transformação com a deformação, enquanto que Pandi et al.¹⁹ observaram o contrário. Uma possível explicação para essa falta de consenso é que a energia armazenada na deformação, que aceleraria a transformação, possa ser dissipada antes e durante a transformação.

A Figura 3.17, obtida do trabalho de Nakata e Militzer¹¹², mostra os efeitos do tamanho de grão austenítico prévio e da deformação aplicada, por compressão, em corpo-de-prova de um aço microligado ao Nb e Ti, na cinética de transformação da austenita. À medida que o tamanho de grão aumenta, a região de transformação se desloca para temperaturas mais baixas, uma vez que menor quantidade de sítios de nucleação da ferrita estão disponíveis. A deformação aplicada na austenita, ao contrário, aumenta as temperaturas de transformação, devido ao aumento da quantidade de sítios por unidade de volume disponível para a nucleação da nova fase.

A Figura 3.17 fornece uma idéia clara, mas muito sucinta, dos efeitos do tamanho de grão e da deformação aplicada. Na verdade, uma vez que a cinética de transformação é alterada, todas as características microestruturais do material transformado podem ser influenciadas, ou seja, as fases/constituintes formados, suas composições químicas e características dimensionais. Uma maneira mais interessante de visualizar tais efeitos é através da construção de diagramas CCT.

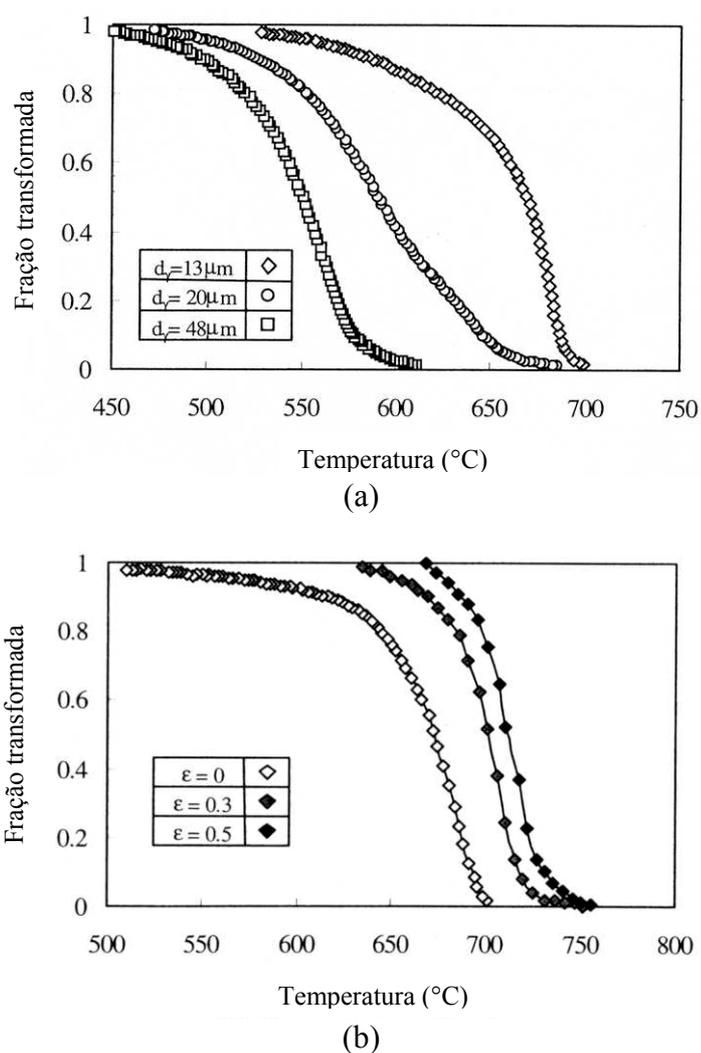


Figura 3.17 - Efeitos do tamanho de grão inicial d_γ , (a), e da deformação aplicada ϵ , (b), na cinética de transformação da austenita em resfriamento contínuo¹¹².

Na Figura 3.18, diagramas CCT obtidos por Cizek et al.³⁸ mostram o efeito da aplicação de uma deformação de 0,47 por compressão a 875°C, antes de iniciar o resfriamento contínuo do corpo-de-prova de um aço microligado ao Nb e Ti. O estudo destes autores envolveu uma caracterização completa da microestrutura obtida após transformação, relacionando-a aos efeitos da deformação aplicada, da taxa de resfriamento e da composição química. O aspecto de destaque nessa figura é que a deformação da austenita ampliou o campo de formação de ferrita poligonal (PF), em detrimento da formação de constituintes de baixas temperaturas tais como ferrita granular (GF) e ferrita bainítica (BF). Nesse estudo, as temperaturas de início de transformação elevaram-se ligeiramente com a deformação aplicada.

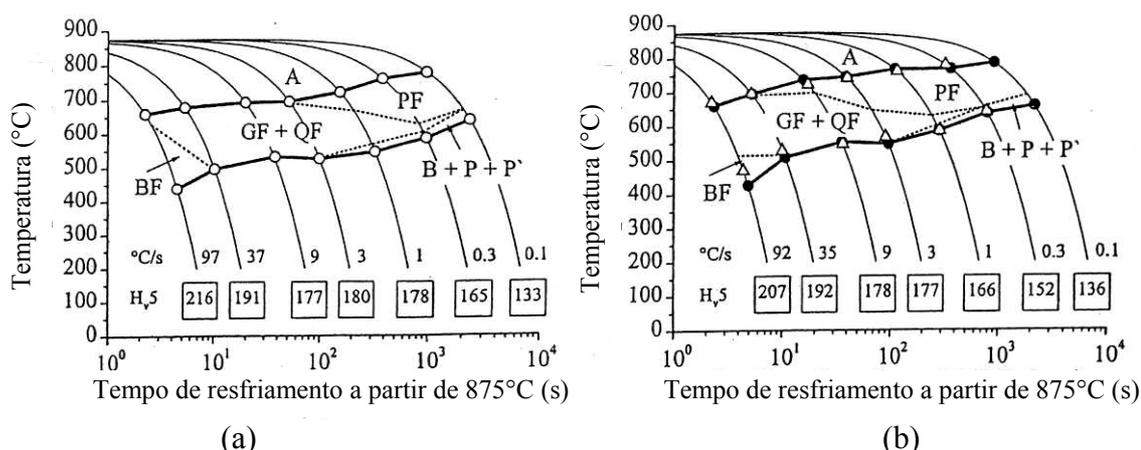


Figura 3.18 - Diagramas CCT de um aço baixo carbono microligado ao Nb e Ti, obtidos a partir da austenita recristalizada, em (a), e deformada, em (b), mostrando a ampliação do campo da ferrita poligonal com a deformação³⁸.

Os resultados da Figura 3.18 estão de acordo com um fato patente em vários estudos já realizados^{37,108,110}, em que a deformação da austenita antes da transformação favorece a formação da ferrita poligonal. Isso está associado à elevação da temperatura de início de transformação devido ao aumento da densidade de sítios de nucleação. Assim, a difusão de C e, eventualmente de elementos substitucionais, fica favorecida, provocando aumento da quantidade de ferrita poligonal, que é formada por mecanismos difusionais.

Por outro lado, para a formação de produtos de baixa temperatura de transformação o efeito da deformação da austenita não está claro. Os resultados obtidos por Cizek et al.³⁸ não indicaram efeito da deformação nas temperaturas de formação nem na amplitude dos campos dos constituintes aciculares, enquanto que Yamamoto et al.⁴⁰ concluíram que a deformação da austenita acelera a formação da ferrita bainítica. Adicionalmente, eles concluíram que o tamanho de grão inicial não altera essa transformação, chamando atenção de que isso é uma evidência de que a transformação bainítica não é controlada por processos difusionais.

Bengochea et al.¹¹¹ analisaram os efeitos da deformação, do tamanho de grão inicial e da taxa de resfriamento sobre a fração volumétrica de ferrita e o tamanho de grão ferrítico de um aço microligado ao Nb (Aço S1) e de um aço microligado ao Nb e V (Aço S2). A deformação foi aplicada por torção numa seqüência de passes simulando a laminação de chapas grossas. A Figura 3.19 mostra o efeito do tamanho de grão austenítico na fração

volumétrica de ferrita e no tamanho de grão ferrítico. O tamanho de grão ferrítico foi sempre menor no caso da amostra deformada, mesmo para valores equivalentes de S_v da austenita, nas condições deformada (deformação verdadeira = 1) e não deformada. Além disso, a fração volumétrica de ferrita foi sempre superior no caso da amostra deformada.

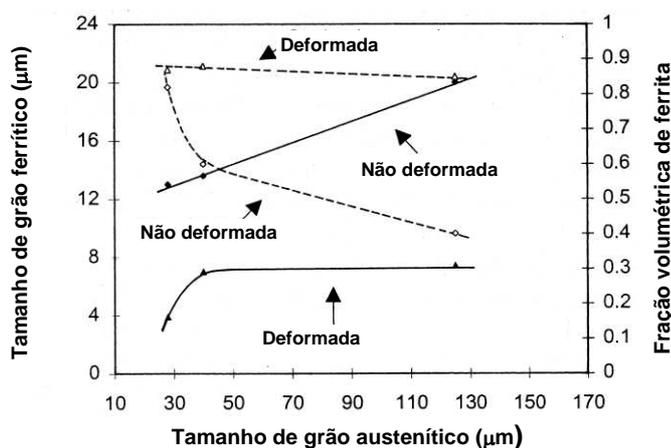


Figura 3.19 - Tamanho de grão ferrítico médio (símbolos cheios) e fração volumétrica de ferrita (símbolos vazios) em função do tamanho de grão austenítico inicial, para a austenita deformada e não deformada¹¹¹.

Porém, como mostra a Figura 3.20, à medida que a deformação da austenita aumenta, o efeito do tamanho de grão inicial diminui, tornando-se desprezível para deformações verdadeiras da ordem de 1,5. Isto significa que uma grande deformação implica em aumento significativo de locais para nucleação da ferrita, compensando a redução da quantidade de contornos da austenita disponíveis.

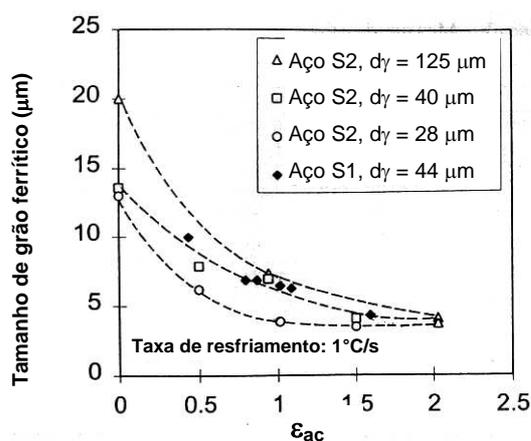


Figura 3.20 - Influência da deformação acumulada, ϵ_{ac} , no tamanho de grão ferrítico para diferentes tamanhos de grão austenítico inicial¹¹¹.

3.5.3. Efeito das condições de resfriamento

As condições de resfriamento são traduzidas pela taxa instantânea de resfriamento do material. Na maioria dos estudos, visa-se uma taxa aproximadamente constante numa ampla faixa, de forma que um valor médio torna-se bastante representativo do processo. O aumento da taxa de resfriamento diminui as temperaturas de transformação, aumentando a propensão à formação de constituintes de não-equilíbrio, além de refinar a microestrutura. Com relação à cinética, em temperaturas mais baixas, a reação tende a ser mais rápida^{16,100}.

A Figura 3.21 mostra que a temperatura A_{r3} diminui com o aumento da taxa de resfriamento na faixa de 1 a 10°C/s, tanto para amostras deformadas, quanto não deformadas. Vale ressaltar nesta figura que o modo de aplicação e a quantidade de deformação aplicada também influem na temperatura A_{r3} . No entanto, à medida que a taxa de resfriamento cresce, o efeito da aplicação ou não e da quantidade/modo de aplicação de deformação decresce, de forma que a 10°C/s praticamente não existe mais influência da deformação.

A Figura 3.22 mostra, para as condições de ensaio utilizadas, que à medida que a deformação acumulada aumenta, o efeito da taxa de resfriamento no tamanho de grão ferrítico diminui, tornando-se desprezível para deformações em torno de 1.

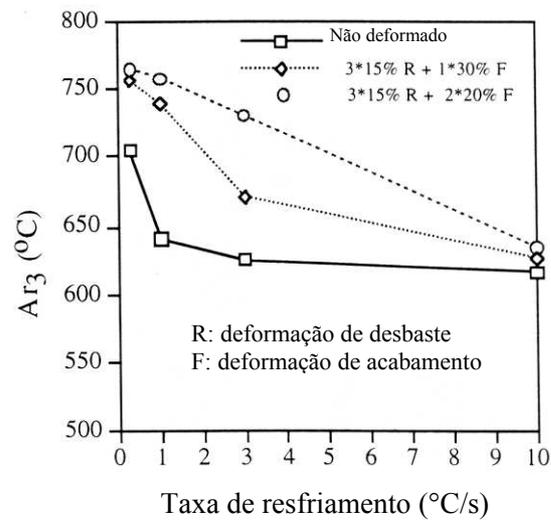


Figura 3.21 - Efeito da taxa de resfriamento na temperatura A_{r3} , para diferentes condições de deformação da austenita em um aço C-Mn-Si-Nb-Ti-Mo¹⁰⁸.

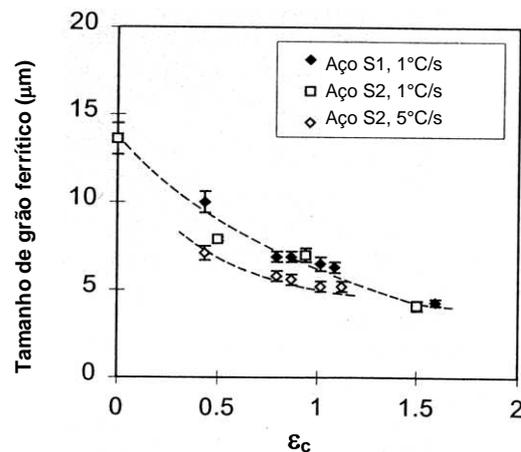


Figura 3.22 - Influência da deformação acumulada no tamanho de grão ferrítico, em diferentes taxas de resfriamento, sendo o tamanho de grão austenítico da ordem de $40 \mu\text{m}$ ¹¹¹.

A maioria dos trabalhos de literatura não comenta sobre a forma de cálculo da taxa de resfriamento. Na verdade, esta é uma questão importante, pois existem várias possibilidades de cálculo, tais como: taxa média durante o período de transformação; taxa média desde o início de resfriamento até o final da transformação; taxa média do início de resfriamento até o início de transformação; taxa média num intervalo específico de temperatura, por exemplo entre 800°C e 500°C ; finalmente, taxa instantânea numa certa temperatura. Ao se compararem resultados, é necessário um cuidado especial nesse sentido. Por exemplo, no resfriamento natural de uma peça, a

temperatura tem um decaimento exponencial, o que leva os cálculos de taxa pelas formas citadas a fornecerem resultados muito diferentes.

Nos estudos sobre a transformação da austenita em resfriamento contínuo encontrados na literatura^{26,37-40,110,112,113}, o material é resfriado continuamente durante toda a faixa de transformação através de um mesmo regime, ou seja, a taxa programada de resfriamento é mantida até o final da transformação. Isso é adequado para se entender o efeito dessa taxa. No entanto, quando se pensa em simular ou prever a transformação na realidade do processo industrial de laminação de tiras a quente, é necessário considerar o bobinamento, a partir do qual a taxa de resfriamento cai bruscamente, de valores da ordem de 10°C/s para cerca de 1°C/min⁴¹. Em toda a literatura consultada, somente os trabalhos de Pereloma et al.¹¹⁴, Donnay et al.¹¹⁵, Debray et al.¹¹⁶ e Thomson et al.¹¹⁷ consideram o efeito da temperatura de bobinamento na microestrutura formada, especialmente no tamanho de grão ferrítico. Os dois primeiros trabalhos foram voltados para caracterização da microestrutura de aços microligados ao Nb e os outros dois, para modelamento da transformação de aços CMn e microligados. Pereloma et al.¹¹⁴ mostraram que existe um efeito marcante da temperatura de bobinamento na microestrutura formada e que, mesmo usando-se ciclos termomecânicos constituídos de encharque, deformação de desbaste, deformação de acabamento e resfriamento acelerado, não houve reprodução em laboratório da microestrutura obtida industrialmente. Por outro lado, Donnay et al.¹¹⁵ usaram correções do tamanho de grão ferrítico final calculado por expressões deduzidas a partir de ensaios em resfriamento contínuo, em função da temperatura de bobinamento.

3.5.4. Efeito da adição de Nb

Desde o início da utilização maciça do Nb como elemento microligante nos aços, na década de 1960, seu efeito no processamento termomecânico e na transformação da austenita tem sido largamente estudado. No caso da transformação difusional da austenita para ferrita e perlita, parece bem definido o efeito do Nb, porém, para a formação de produtos de não-equilíbrio, onde a importância da difusão é ainda controversa, a forma como o Nb influi na transformação não está clara.

Lee et al.¹¹⁸ fizeram uma síntese, baseando-se em estudos anteriores, do efeito do Nb na transformação da austenita, e desenvolveram modelos termodinâmicos e cinéticos para previsão de sua transformação para ferrita, simultaneamente à precipitação de Nb(C,N). De acordo com esse estudo e com outros sobre a transformação da austenita em aços microligados^{39-39,53,85,108,119}, uma série de conclusões podem se obtidas, as quais são mostradas a seguir.

O Nb em solução sólida eleva ligeiramente a temperatura de equilíbrio Ae_3 , o que pode ser atribuído ao seu efeito em expandir o campo de estabilidade da ferrita, e abaixa a temperatura de início de formação da ferrita em resfriamento contínuo, Ar_3 , devido à sua segregação nos contornos da austenita. Com o abaixamento da Ar_3 , é favorecida a formação de constituintes aciculares na decomposição da austenita. Durante a transformação, a presença de átomos do soluto Nb na interface ferrita/austenita causa um atraso no progresso da transformação, pelo efeito de arraste do soluto. Assim, tanto o início quanto a cinética da transformação são reduzidos. Porém, um fator adicional para esse retardo é a formação de precipitados finos na interface de fases durante a transformação, que diminuem a mobilidade da frente de reação. A Figura 3.23 mostra diagramas TTT, obtidos por Lee et al.¹¹⁸, experimentalmente e através de cálculos teóricos, que mostram o atraso na transformação de um aço com adição de Nb em relação a um aço CMn. A figura mostra que, além da ferrita, a formação da perlita também é retardada pela adição de Nb.

De acordo com Lee et al.¹¹⁸ se o Nb encontra-se presente na forma de precipitados relativamente grosseiros antes da transformação, o início de transformação pode ser acelerado, uma vez que eles representam sítios potenciais para nucleação da ferrita.

Em estudos tais como o de Lee et al.¹¹⁸, o material foi austenitizado e, em seguida, a transformação da austenita, isotérmica ou sob resfriamento contínuo, ocorreu sem aplicação de deformação na austenita prévia. Essa situação, embora extremamente útil para o estudo do efeito do Nb na transformação, e muito utilizada^{26,38-39,120-121}, não se aproxima das condições industriais de processamento dos aços microligados de alta resistência, onde os últimos passes de laminação são realizados na região de não-recristalização da austenita. No processamento termomecânico desses aços, a austenita

encontra-se encruada antes da transformação, de forma que o efeito do Nb precisa ser determinado nessa condição.

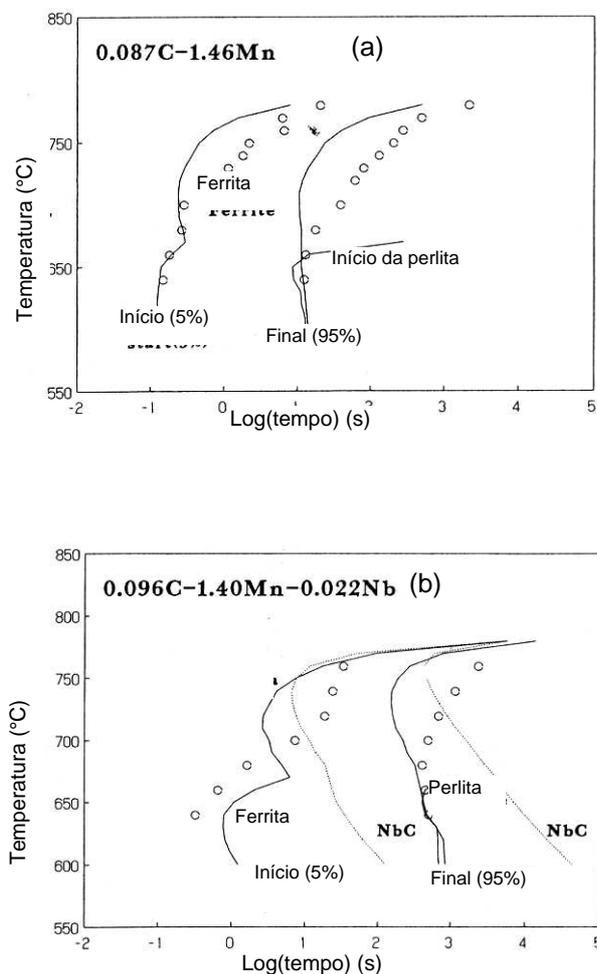


Figura 3.23 - Comparação entre curvas TTT calculadas (linhas contínuas) e experimentais (círculos), de aços C-Mn (a), e de aços C-Mn-Nb, (b), mostrando o atraso no início de transformação da austenita¹¹⁸.

A não recristalização completa da austenita, em condições de processamento industrial, abaixo de uma certa temperatura de laminação, tem sido atribuída à ocorrência da precipitação de Nb(C,N) induzida pela deformação¹²², embora Bai et al.¹⁰⁹ tenham mostrado que pode haver supressão da recristalização mesmo na ausência de tal precipitação, devido ao Nb em solução sólida, que exerce efeito de arraste de soluto. No caso da austenita deformada, a transformação para a ferrita é acelerada, em relação ao caso da austenita recristalizada, o que é explicado pelo aumento dos sítios preferenciais para nucleação. Esse assunto foi tratado em mais detalhes no item 3.5.2. No entanto,

adicionalmente ao efeito da maior quantidade de sítios de nucleação devido à deformação, deve-se ressaltar que a precipitação induzida de carbonitreto reduz a quantidade de Nb em solução, diminuindo seu efeito retardador na transformação. Além disso, os precipitados podem atuar também como locais de nucleação. Essa é outra maneira de interpretar o efeito da deformação da austenita na transformação para ferrita.

3.6 Métodos Experimentais de Estudo da Transformação da Austenita

Os aspectos quantitativos do estudo da transformação da austenita em resfriamento contínuo são as temperaturas de início e de fim de transformação de cada constituinte e a evolução da fração transformada com o tempo (cinética de transformação), ou, indiretamente, com a temperatura. Existem várias técnicas para estudo da transformação, tais como: (a) análise metalográfica; (b) dilatométrica; (c) análise térmica diferencial; (d) medidas da relaxação de tensão; (e) método calorimétrico; (f) medidas magnéticas.

3.6.1. Método metalográfico

Neste método, faz-se uma têmpera dos corpos-de-prova em vários instantes ao longo da transformação. A austenita se transforma em martensita na têmpera, permitindo que seja distinguida, por adequado ataque químico, das fases formadas. A fração transformada é determinada por metalografia ótica quantitativa. A análise metalográfica é direta e razoavelmente precisa, porém é muito trabalhosa e requer grande quantidade de corpos-de-prova para se obter uma curva de transformação. Por isso, tem sido utilizada apenas em estudos mais detalhados sobre os mecanismos de transformação^{26,41,63,123}.

3.6.2. Dilatometria

A técnica dilatométrica consiste na medição das variações dimensionais do corpo-de-prova em ciclos térmicos que incluem a faixa de transformação. Essa é a técnica mais importante e mais utilizada em estudos de transformação de fase. Informações quantitativas sobre a evolução da formação dos constituintes podem ser obtidas com ótima precisão. Numerosos trabalhos de literatura abordam essa técnica, podendo ser consultados aqueles de Eldis¹²⁴ e Prior¹²⁵, que fornecem detalhes sobre a técnica. O autor desta proposta utilizou, em estudos sobre a transformação de aços CMn, ensaios

dilatométricos¹⁵⁻¹⁷. Uma questão muito importante é, dada a curva dilatométrica, como obter a evolução da transformação. Essa questão é abordada no item 3.7.

3.6.3. Análise térmica diferencial

Essa técnica consiste na detecção da transformação através de variações na derivada primeira da curva de temperatura versus tempo registrada no corpo-de-prova. A técnica de análise térmica diferencial foi utilizada em alguns estudos^{100,121,126} da transformação dos aços em resfriamento contínuo. Similarmente à técnica de relaxação de tensões, a vantagem seria a possibilidade de serem aplicadas várias deformações antes da transformação. Porém, questiona-se a precisão dessa técnica na definição das temperaturas críticas de transformação, uma vez que a derivada da temperatura normalmente apresenta uma transição suave no início e ao final da transformação. Além disso, conforme o trabalho de Cota et al.¹⁰⁰, somente a temperatura de início de transformação pode ser estudada, e não a cinética de transformação. A taxa também não pode ser mantida constante, pois não haveria variação na derivada primeira.

3.6.4. Medidas de relaxação de tensões

Essa técnica se baseia na menor resistência à deformação da ferrita em relação à austenita, numa mesma temperatura. Ela foi proposta por Liu et al.¹²⁷, e consiste em manter o corpo-de-prova sob deformação constante durante a transformação. A formação da ferrita causa uma variação no comportamento da curva tensão com o tempo, indicando a ocorrência da transformação. Uma vantagem dessa técnica seria a possibilidade de se estudar a transformação após aplicação de vários passes de deformação, por torção, de modo a obter uma melhor aproximação do processo industrial.

No presente estudo, foi feita uma avaliação preliminar da possibilidade de aplicação dessa técnica, através de ensaios na máquina Gleeble 3500. Os corpos-de-prova foram encharcados a 1100°C por 1 min, resfriados até 1050°C, onde foi aplicada uma deformação equivalente de 0,4 por torção. Posteriormente o corpo-de-prova foi resfriado até 950°C, onde foi repetida a deformação de 0,40, a qual foi mantida enquanto o corpo-de-prova foi resfriado naturalmente, com taxas da ordem de 10°C/s, medindo-se o torque. A análise das curvas obtidas de torque não permitiram definir

claramente a região de transformação. Portanto, essa técnica não mostrou-se adequada à realização dos ensaios para modelamento da transformação neste trabalho.

3.6.5. Método calorimétrico

Essa técnica se baseia no fato de que as transformações de fase envolvem variações de entalpia. No caso dos aços, durante a decomposição da austenita, a entalpia dos produtos é menor que a da austenita, causando a liberação de calor. A quantidade de calor liberada pode ser medida por um calorímetro, gerando informações sobre a transformação. Exemplos de utilização do método calorimétrico podem ser vistos em Pan²², Qiu et al.⁵⁹ e Debray et al.¹¹⁶.

3.6.6. Medidas magnéticas

O princípio dessa técnica é que a ferrita, abaixo do ponto Curie, em torno de 770°C, é ferromagnética, enquanto a austenita é paramagnética. Medições da resposta do corpo-de-prova a um campo magnético têm sido utilizadas para avaliar a transformação da austenita para ferrita por alguns pesquisadores^{110,128}, mas esse método ainda não está definitivamente estabelecido como ferramenta para determinação da cinética de transformação.

3.7 Estudo da Transformação Baseando-se em Curvas Dilatométricas

3.7.1. Temperaturas de transformação

As temperaturas de início e de final de transformação podem ser obtidas de forma relativamente fácil a partir das curvas dilatométricas, prolongando-se os trechos retos relativos às regiões de contração da austenita e dos produtos da transformação. Tais temperaturas são definidas no ponto em que ocorre desvio da linearidade. Embora seja trivial o conceito, a determinação dessas temperaturas apresenta alguma subjetividade ainda, uma vez que os desvios da linearidade ocorrem suavemente em uma região. Alguns trabalhos¹²⁹⁻¹³⁰ na literatura destacaram esse aspecto, e definiram dois valores distintos para cada temperatura mencionada, uma aparente e outra real. O emprego das derivadas primeira e segunda da curva dilatométrica auxilia na determinação das temperaturas mencionadas.

Admitindo-se que as fases formadas sejam seqüenciais, ou seja, não existe formação de mais de uma fase/constituente simultaneamente, torna-se importante determinar as temperaturas em que cessa a formação de uma fase e começa a seguinte. Eldis¹²⁴ apresenta comportamentos possíveis de ser obtidos nas curvas dilatométricas, onde esses pontos podem ser claramente percebidos. Porém, na maioria dos ensaios dilatométricos reais tais características não são observadas. Nesse caso, precisam ser definidos critérios associados à cinética de transformação, onde essa transição ocorre.

Para o início de formação da perlita, às vezes é possível a determinação da temperatura correspondente diretamente da curva dilatométrica, embora a precisão seja bem menor que para a temperatura Ar_3 . Portanto, é desejável um critério melhor para isso. Suehiro et al.^{6,7,80-84} aplicaram a sugestão de Hultgren¹³¹ para extrapolação da linha de equilíbrio A_{cm} abaixo da linha Ae_1 . O critério utilizado por Suehiro foi de que perlita começa a se formar no momento em que a concentração de C na austenita atinge a linha A_{cm} extrapolada. Vários pesquisadores utilizaram posteriormente este critério^{61,86,115,132}. Para essa determinação são necessários cálculos termodinâmicos das linhas de equilíbrio, além de se conhecer a cinética de transformação para que o enriquecimento em C da austenita seja calculado. Em trabalho desenvolvido pelo presente autor^{15,17}, foi aplicado esse critério para cálculo da temperatura de início de formação da perlita durante resfriamento contínuo de aços CMn. A Figura 3.24 ilustra este conceito.

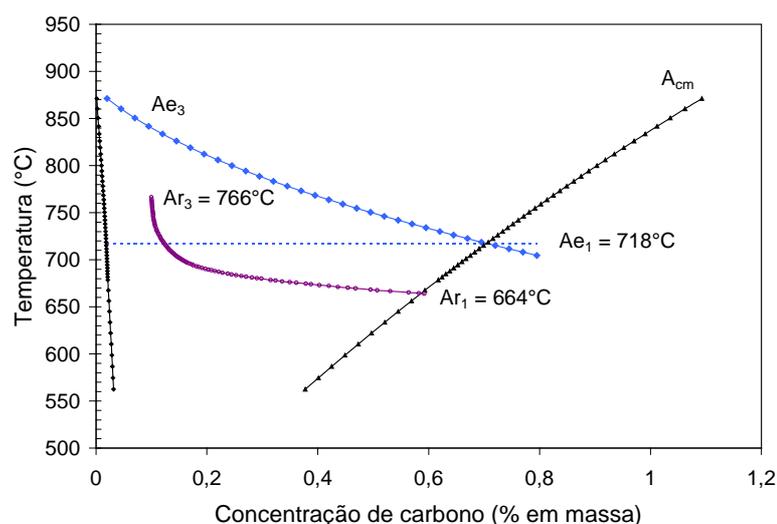


Figura 3.24 - Diagrama mostrando a evolução do teor de C na austenita durante a transformação para um ensaio com o aço 0,10%C-0,81%Mn, encharcado a 1100°C e resfriado a 10°C/s a partir de 900°C¹⁷.

Militzer¹⁰⁶ cita um critério proposto por Umemoto et al.⁸⁸ para a transição ferrita/perlita baseado na velocidade da interface ferrita/austenita. Porém, se a fração de perlita é menor que 5% não vale a pena usar este critério, pois ele fornece valores que divergem das medições. Ainda segundo Militzer et al.¹³, este critério de transição de velocidade crítica não funciona para aços HSLA. Assim, este autor estabeleceu equações específicas para calcular a temperatura de transição em função da deformação.

Para a transição para bainita, um critério simples e muitas vezes usado^{80,83,94} implica no atingimento da temperatura de início de formação da bainita, B_s , como já mostrado na Figura 3.16. Saito³ cita como critério para transição para formação de bainita quando a variação de energia livre na transformação austenita/ferrita for maior que 400 J/mol.

Finalmente, deve-se ressaltar que, devido à maior parte dos estudos sobre a transformação considerarem a decomposição da austenita apenas para uma fase, relativamente poucas informações são encontradas a respeito de critérios para transição entre formação de outros constituintes.

3.7.2. Determinação da fração transformada pela regra da alavanca

O método mais simples e mais utilizado para determinar a fração transformada a partir de curvas dilatométricas é a chamada regra da alavanca. A Figura 3.25 ilustra esse método a partir de uma curva medida em um ensaio na Gleeble. Fazendo-se os prolongamentos dos trechos retos relativos à contração térmica da austenita e dos produtos de transformação, a fração transformada da austenita é dada pela proporção entre os segmentos de reta, como indicado. Também é mostrado nessa figura o procedimento de determinação das temperaturas de início, A_{r3} , e final de transformação, A_{rf} .

A regra da alavanca é absolutamente correta somente quando a austenita se transforma em um único produto, sem haver variação da composição química da austenita, ou seja sem repartição de soluto. Esse seria o caso da transformação da austenita em martensita. Se a transformação ocorre somente para um produto, como por exemplo a ferrita, o enriquecimento da austenita em C durante a transformação poderia causar pequeno erro no cálculo, de forma que ela ainda assim pode ser aplicada satisfatoriamente.

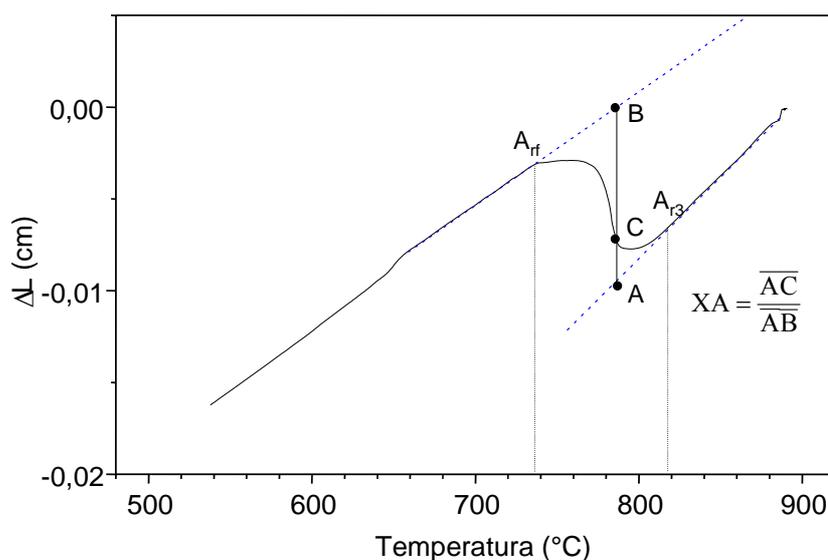


Figura 3.25 - Método da regra da alavanca para cálculo da fração transformada da austenita, X_A , a partir da curva dilatométrica.

Quando são formados mais de um produto, como ferrita, perlita e bainita, por exemplo, a regra da alavanca torna-se menos precisa. Entretanto, a maioria dos pesquisadores têm usado essa técnica, mesmo cientes dos pequenos erros que podem ser cometidos. Entre esses pesquisadores de renome mundial, pode ser citada a equipe liderada por Militzer^{13,54,56,106,112}. Alguns autores utilizaram formas diferentes de avaliação da fração transformada, mas um exame mais detalhado de suas equações mostra que elas reduzem-se à regra da alavanca^{72,127}.

3.7.3. Métodos que consideram o enriquecimento da austenita em carbono

Mais recentemente, surgiram novas metodologias de cálculo da fração dos constituintes formados a partir das curvas dilatométricas^{20,133-136}. Todas elas, entretanto, envolvem uma formulação matemática não simples, levando à necessidade de utilização de métodos numéricos associados a rotinas computacionais.

Kop et al.¹³⁴ desenvolveram um método que permite determinar a evolução das frações formadas de ferrita e perlita, considerando-se as variações dos parâmetros de rede da ferrita e da cementita com a temperatura, e da austenita com a temperatura e com o teor de C. Gómez e Medina¹³⁷ aplicaram esse método para a análise de transformação de aços baixo carbono microligados ao Nb, durante resfriamento contínuo. Os autores concluíram que esse método é mais preciso que a regra da alavanca quando existe a

formação de perlita, pois a fração medida desse constituinte foi melhor prevista por esse método que pela regra da alavanca. A fração final de ferrita calculada pelo método de Kop et al. é inferior à calculada pela regra da alavanca.

Em estudo do presente autor¹⁶, o método de Kop et al.¹³⁴ foi aplicado para a análise da evolução da fração transformada em aços CMn resfriados continuamente. Para sua aplicação, foi desenvolvida uma rotina computacional. Vale ressaltar que, além dos cálculos relativos ao método em si, são necessários cálculos termodinâmicos envolvendo a determinação do teor de C na ferrita. A regra da alavanca também foi aplicada nesse estudo. Contudo, não se verificou vantagem da aplicação do método de Kop et al.¹³⁴ sobre a regra da alavanca, em relação à aproximação entre os resultados previstos e os determinados experimentalmente por análise metalográfica dos corpos-de-prova ensaiados. A Figura 3.26 mostra uma comparação entre as curvas calculadas pelos dois métodos. No início da transformação a regra da alavanca prevê uma fração transformada menor que o método de Kop, e no final da transformação, o resultado se inverte.

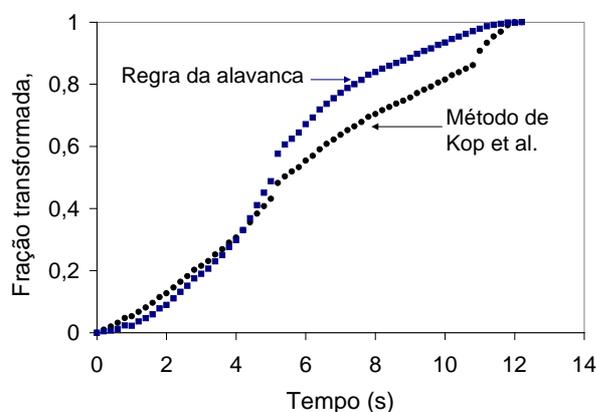


Figura 3.26 - Comparação entre curvas, calculadas por diferentes métodos, da cinética de transformação global da austenita em ferrita e perlita em um aço 0,10%C-0,40%Mn, resfriado a 10°C/s após encharque a 900°C por 2 min.

No mesmo ano (2003) em que Gómez e Medina¹³⁷ publicaram o trabalho com a aplicação do método de Kop et al.¹³⁴, Choi¹³⁶ apresentou uma formulação para análise da curva dilatométrica de aços resfriados continuamente e transformados em ferrita e perlita. A base da formulação parece semelhante à de Kop et al., pois são levadas em consideração as variações dimensionais do material devido a: (i) mudança de parâmetro

de rede devido à formação de ferrita e cementita; (ii) contração térmica da austenita e dos constituintes formados; (iii) enriquecimento da austenita em C, durante a formação da ferrita proeutetóide. Ressalta-se que a aplicação das equações propostas requer, além de seu completo desenvolvimento e de dados sobre variações dimensionais dos parâmetros de rede das fases, cálculos termodinâmicos para determinação de concentrações de C. No trabalho de Choi¹³⁶, tais cálculos foram realizados com o pacote Thermocalc.

Zhao et al.^{20,135} apresentaram uma metodologia para a obtenção da fração transformada a partir das curvas dilatométricas. A base para o desenvolvimento é a mesma considerada por Kop et al.¹³⁴ e Choi¹³⁶, ou seja, a variação dimensional do corpo-de-prova é o somatório de três contribuições. A formulação matemática é muito complexa e foi apresentada sucintamente nos artigos referenciados. Também, são necessários cálculos termodinâmicos, que foram obtidos pelo uso do programa Thermocalc pelos autores. Como mostrado no exemplo dado no trabalho, a aplicação do método de Zhao permite a estimativa das frações formadas de ferrita, perlita e bainita. A Figura 3.27 mostra um gráfico onde foram indicadas as frações formadas desses constituintes e a evolução do teor de carbono na austenita ao longo da transformação. Nesse gráfico, f_γ é a fração de austenita transformada, $f_{p\alpha}$, a fração de ferrita proeutetóide final, C_γ , o teor de C na austenita e B_s , a temperatura de início de formação da bainita.

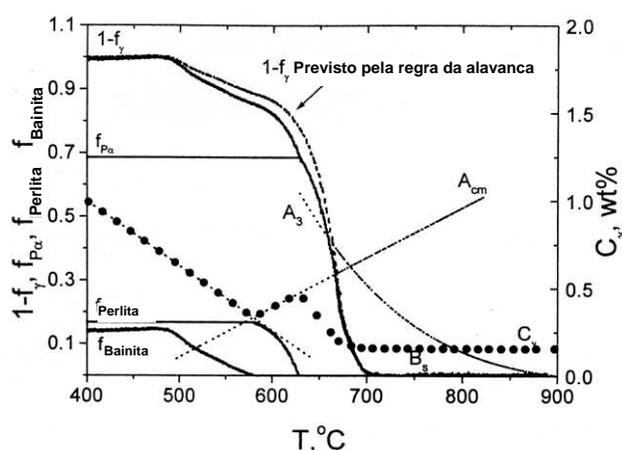


Figura 3.27 - Exemplo de cálculo da evolução das frações formadas de ferrita, perlita e bainita em um aço de médio C, microligado ao Nb e Ti, resfriado a 6°C/s após encharque a 1200°C. Cálculos segundo a metodologia proposta por Zhao et al.^(20,135).

3.8 Modelamento Matemático da Transformação da Austenita

O modelamento da transformação inclui a previsão das temperaturas críticas, que são as temperaturas onde começa e termina a formação das fases/constituintes, a evolução da fração transformada com o tempo (cinética de transformação), ou temperatura, e a previsão de características da microestrutura final, tais como o tamanho de grão ferrítico, as frações dos constituintes e o espaçamento interlamelar da perlita.

A característica mais fundamental para o modelamento da transformação da austenita é sua cinética. Diversas formas de modelamento têm sido usada em trabalhos publicados. Na presente revisão é feita uma descrição relativamente sucinta das principais metodologias. Antes de apresentar as diferentes metodologias, porém, é apresentada a fundamentação da regra da aditividade, importante na conversão de dados de transformação em condições isotérmicas para resfriamento contínuo.

3.8.1. Regra da aditividade

Visando determinar a cinética de transformação em condições não isotérmicas, a partir dos diagramas TTT, Scheil, citado por Hawbolt et al.⁶⁹, propôs que o tempo para início de transformação em resfriamento contínuo fosse calculado considerando-se que a curva de resfriamento contínuo pudesse ser dividida em vários pequenos intervalos isotérmicos. O tempo de início de transformação corresponderia ao momento em que a soma das frações obtidas pela razão entre estes intervalos de tempo, na condição isotérmica, e o tempo de início de transformação naquela temperatura, $\tau(T)$, atingisse a unidade. A equação (3.18) mostra este conceito, de forma matemática, o qual ficou definido como a *regra da aditividade*.

$$\int_0^t \frac{dt}{\tau(T)} = 1 \quad (3.18)$$

A regra da aditividade, proposta originalmente para apenas o tempo de início de transformação, foi estendida por Avrami para incluir toda a transformação e, mais tarde, por Cahn⁹¹, com o objetivo de prever a cinética de transformação em resfriamento contínuo a partir de dados obtidos em condições isotérmicas, na transformação para

uma única fase. Dessa forma, o tempo total para atingir uma fração transformada específica, na condição de resfriamento contínuo, é obtido pela adição das frações de tempo para atingir esta fração isotermicamente, até que a soma atinja a unidade, equação (3.19).

$$\int_{t_s}^{t_{X_a}} \frac{dt}{t_a(T)} = 1 \quad (3.19)$$

Nesta equação, $t_a(T)$ é o tempo isotérmico para atingir a fração transformada X_a , na temperatura T , e t_s e t_{X_a} são os tempos de início e de fim para se atingir X_a , respectivamente, em condições de resfriamento contínuo.

3.8.1.1 Fundamentação teórica e prática para validade da regra da aditividade

A regra da aditividade tem sido utilizada de maneira generalizada para o modelamento das transformações no estado sólido em resfriamento ou aquecimento contínuo, mas muitas vezes sem a devida avaliação de sua validade, o que pode levar a imprecisões. Desde o seu estabelecimento e adoção como importante ferramenta, as condições em que esta regra vale para as transformações de fase têm sido bastante estudadas^{27,69,91,138-140}. Disso, resultaram três condições consideradas suficientes para que a transformação seja aditiva:

- (i) condição isocinética;
- (ii) saturação de sítios;
- (iii) condição de crescimento limitado.

A condição isocinética ocorre quando é mantida uma proporcionalidade entre as velocidades de nucleação e de crescimento ao longo de toda a reação. Isto implica que estas velocidades são função apenas da temperatura, e não do tempo. Com isso, Cahn⁹¹ mostrou que a condição isocinética é obtida quando a equação (3.20) é obedecida. Aplicada à equação para a cinética de transformação isotérmica de Avrami, equação (3.10), este critério significa que a constante b seja função apenas da temperatura e n seja constante no intervalo de temperaturas de interesse para a transformação.

$$\frac{dX}{dt} = f(T).g(X) \quad (3.20)$$

Ampliando um pouco mais o conceito, Cahn⁹¹ concluiu que a condição isocinética é obtida se a velocidade de transformação depender apenas da temperatura e do estado de transformação, conforme equação (3.21). A utilização desta equação como condição para validade da regra da aditividade tem sido adotada na literatura^{27,141} de forma geral.

$$\frac{dX}{dt} = h(T, X) \quad (3.21)$$

No entanto, mais recentemente, Lusk¹⁴² mostrou, matematicamente, que toda transformação dada em (3.20) obedece à condição isocinética, ou seja, esta é uma condição suficiente para aplicação da regra da aditividade. Por outro lado, nem toda transformação do tipo (3.21) obedece à condição isocinética e, portanto, pode não ser aditiva.

Christian¹⁴³ examinou a regra da aditividade de acordo com o procedimento mostrado na Figura 3.28. A amostra é transformada à temperatura T_1 , onde a expressão da cinética é $X = f_1(t)$, por um tempo t_1 . A amostra é, então, transferida rapidamente para uma segunda temperatura T_2 . Se a transformação é aditiva, a transformação em T_2 seria a mesma se a fração formada em T_1 , $f_1(t_1)$, fosse formada em T_2 , de acordo com a função $f_2(t_2)$.

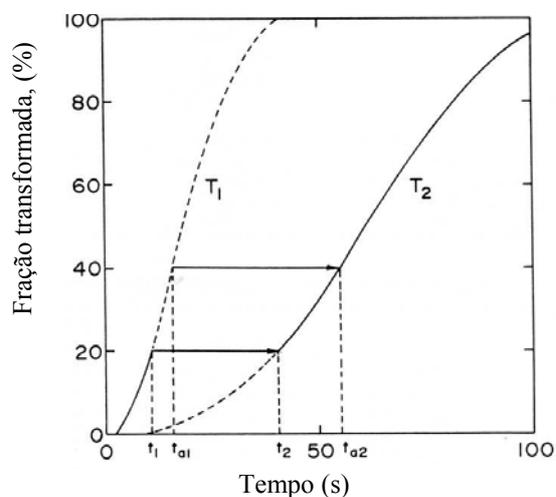


Figura 3.28 - Representação esquemática do princípio da aditividade¹⁴³.

Por exemplo, seguindo o raciocínio apresentado por Christian¹⁴³, na Figura 3.28, t_{a1} é o tempo gasto para produzir $X_a = 40\%$ na temperatura T_1 e t_{a2} , o tempo correspondente para produzir 40% na temperatura T_2 . Então, se o total transformado na temperatura T_1 for 20%, sendo requerido um tempo t_1 , enquanto t_2 for o tempo equivalente em T_2 para produzir os outros 20% de transformação, a fração total de 40% será produzida num tempo, t , dado por (3.22). Além disso, se a condição isocinética em (3.20) é obedecida, existe proporcionalidade entre os tempos de transformação, como em (3.23).

$$\frac{t_1}{t_{a1}} + \frac{(t - t_1)}{t_{a2}} = 1 \quad (3.22)$$

$$\frac{t_1}{t_2} = \frac{t_{a1}}{t_{a2}} \quad (3.23)$$

Na condição isocinética, o tempo para a transformação de uma fração X_0 , numa temperatura T , fica dado por (3.24), considerando a equação de Avrami.

$$t = -\frac{1}{b(T)^{1/n}} [\ln(1 - X_0)]^{1/n} \quad (3.24)$$

As outras duas condições, estabelecidas teoricamente, para a aplicação da regra da aditividade, a condição de saturação de sítios e a condição de crescimento limitado, podem ser vistas como situações particulares da condição isocinética. Demonstrações teóricas da validade dessas condições foram realizadas por Cahn⁹¹. Diversos trabalhos mostraram que a transformação da austenita para a ferrita obedece à condição de saturação de sítios^{61,85}, sendo os locais de nucleação da nova fase nos contornos de grão da austenita.

Hawbolt et al.^{69,138} concluíram que a regra da aditividade não foi aplicável ao período de início de transformação, conforme proposta original de Scheil⁶⁹, mas sim ao período de transformação somente, e, ainda, dependendo do modo de cálculo da temperatura de início de transformação no resfriamento contínuo. Como o tempo de início de transformação é pequeno em relação ao tempo total, a aplicação da regra da aditividade

para todo o processo resultou válida, mas isso refletiu a predominância do tempo de transformação sobre o de início de transformação.

Kamat et al.²⁷ realizaram um interessante estudo experimental sobre a aplicação da regra da aditividade na transformação da austenita para ferrita em aços carbono, utilizando ensaios dilatométricos em corpos-de-prova tubulares. Os corpos-de-prova, após encharque, foram resfriados rapidamente a uma temperatura T_1 , mantidos nesta temperatura por um tempo suficiente para a transformação parcial, após o qual a temperatura foi rapidamente alterada para T_2 , na qual o corpo-de-prova foi deixado completar a transformação. A temperatura T_2 foi superior ou inferior a T_1 . A Figura 3.29 mostra um exemplo da nucleação da ferrita alotriomórfica nos contornos de grão da austenita, parcialmente transformada a 812°C . A Figura 3.30 mostra o progresso da transformação para as temperaturas T_1 e T_2 , sendo que em 3.30-a, T_2 é menor que T_1 e, em 3.30-b, vice-versa. Em ambos os casos, a transformação continua na temperatura T_2 como se toda ela fosse na condição isotérmica, o que atesta a validade da regra da aditividade. Além disso, como os intervalos entre estas duas temperaturas foi alto, cerca de 40°C , os autores concluem que a aplicação da regra para resfriamento contínuo, onde os intervalos de temperatura são muito menores, ficaria completamente justificada. Além disso, os autores mostraram que, mesmo no caso de alteração da morfologia da ferrita, de alotriomórfica para ferrita de Widmanstätten, a transformação ainda continuou aditiva.

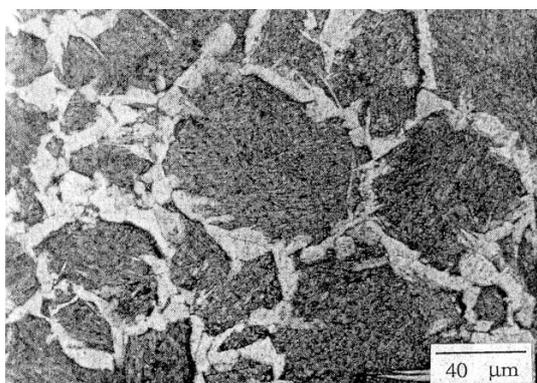


Figura 3.29 - Fotomicrografia do aço 1010 parcialmente transformado a 812°C por 15 s e resfriado em água, mostrando a ferrita proeutetóide nucleando nos contornos de grão da austenita²⁷.

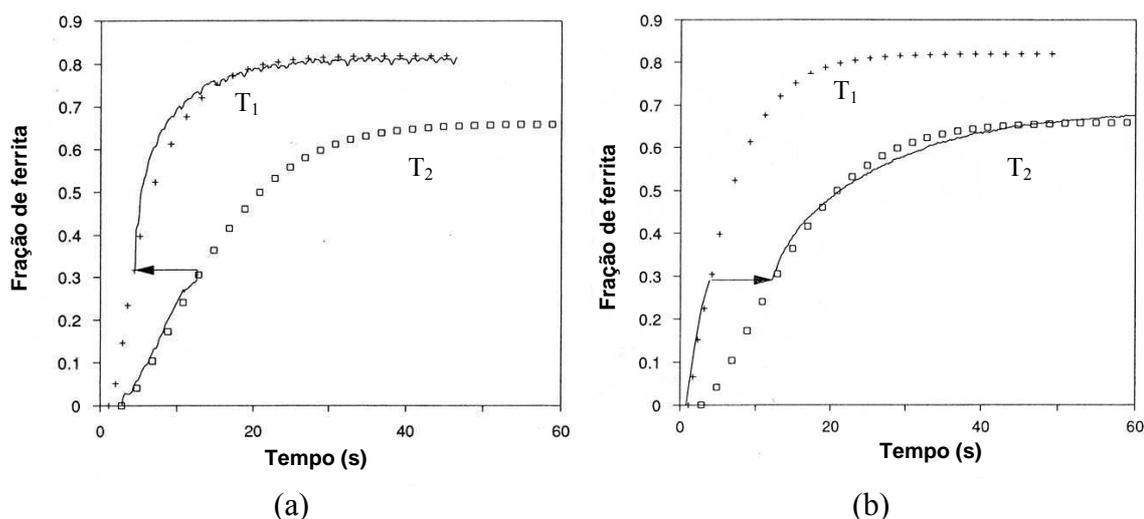


Figura 3.30 - Curvas experimentais de transformação obtidas em condições isotérmicas e em duas temperaturas diferentes para o aço 1010²⁷. Em (a), a transformação começa em T₂ e termina em T₁, e em (b), começa em T₁ e termina em T₂. Em ambos os casos, T₂ é menor que T₁.

Embora as condições de transformação isocinética, saturação de sítios e crescimento limitado, que garantem a validade da regra da aditividade, do ponto de vista teórico, nem sempre sejam obedecidas, felizmente tem sido observado, na prática, que esta regra tem sido aplicada freqüentemente com sucesso para prever as transformações em resfriamento contínuo, a partir de dados obtidos em ensaios isotérmicos. Adicionalmente, proposições de modificação da regra da aditividade têm sido relatadas na literatura^{41,144}, porém Milizter¹⁰⁶ ainda considera sua aplicação como o estado-da-arte para o modelamento global da cinética de decomposição da austenita.

3.8.2. Modelamento via equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade

A equação do tipo Avrami, dada em (3.10), é uma forma simplificada, traduzida em apenas dois parâmetros, de calcular a cinética de transformação. O conhecimento dos valores de b e n diz pouco a respeito dos mecanismos de transformação. Porém, mesmo que as suposições básicas não sejam atendidas, tem-se verificado grande utilização da equação de Avrami, devido à sua simplicidade e à sua aplicabilidade a resultados experimentais. Originalmente, a equação de Avrami foi deduzida para transformação isotérmica, de forma que, em termos de tratamentos térmicos dos aços, é aplicada aos diagramas TTT.

Para as condições de resfriamento contínuo, que são as mais comuns na prática industrial, de interesse para este trabalho, a equação de Avrami pode ser também empregada, desde que a variação contínua de temperatura seja considerada como constituída de uma soma de pequenos intervalos isotérmicos. Mas é necessário aplicar um procedimento que permita computar corretamente os incrementos de fração transformada em cada intervalo. O procedimento existente é a regra da aditividade.

Para o modelamento da transformação em resfriamento contínuo, segundo essa metodologia, é necessário primeiro modelar a transformação isotérmica, por equações do tipo Avrami, e posteriormente aplicar a regra da aditividade. Essa abordagem tem sido utilizada por numerosos pesquisadores^{8-10,69,115,130,132,145,148}, inclusive pela equipe de Militzer et al.^{13,106}. Foi também usada como uma forma de modelamento em aços CMn pelo presente autor¹⁶.

Quando é modelada a transformação para somente uma fase, em um modelo seqüencial de transformação, é necessária uma correção na equação (3.10) ou (3.17), para que a fração transformada situe-se no intervalo entre 0 e 1. Isto é feito dividindo-se a fração obtida a cada instante pela fração da respectiva fase prevista pelo equilíbrio termodinâmico, equação (3.25), onde X_e é a fração da fase modelada prevista pelo equilíbrio.

$$X / X_e = 1 - \exp(-bt^n) \quad (3.25)$$

O primeiro passo para o modelamento da cinética de transformação através da equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade é a determinação dos parâmetros b e n . Várias técnicas que podem ser empregadas são descritas sucintamente a seguir.

A técnica mais usada é a realização de ensaios em condições isotérmicas, seguida do modelamento da cinética da transformação, o que permite a determinação de b e n para a condição de ensaio^{8-9,69,145}. É necessário, daí, expressar tais parâmetros em função das variáveis de ensaio. A principal desvantagem é que são necessários vários ensaios e que, para aços baixo carbono, a cinética de decomposição da austenita é muito rápida, dificultando a obtenção da cinética de transformação isotérmica.

Uma outra maneira de obtenção de b e n é através de diagramas TTT existentes, fazendo-se ou ajustes de equações matemáticas às curvas de início e final de transformação, ou fazendo-se a leitura dos pontos das curvas. Os valores de b e n podem ser descritos por funções matemáticas^{118,149}. Este e o método anterior são muito limitados para aços de baixo teor de C e microligados, pois é praticamente impossível a obtenção de verdadeiras curvas isotérmicas^{70,74}, conforme já discutido nesta revisão.

Uma terceira possibilidade de determinação de b e n é através de um método indireto, onde são feitos ensaios de transformação em resfriamento contínuo e os valores de b e n são determinados considerando-se que as curvas obtidas tenham sido calculadas pela equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade. Variações desse método foram apresentadas por Lee¹⁴¹ e por Han^{10,146}.

No entanto, o que se verifica na literatura é que grande parte dos autores não explicitam a forma de obtenção de b e n , e muitas vezes utilizam valores já encontrados por outros pesquisadores, freqüentemente sem uma devida avaliação crítica de sua aplicabilidade.

Uma limitação da equação de Avrami com a regra da aditividade é a dificuldade de se expressar os parâmetros b e n em função das variáveis de ensaio, uma vez que tais constantes não indicam os mecanismos operantes. Além disso, tais parâmetros devem obedecer as condições de validade da regra da aditividade.

De acordo com os desenvolvimentos de Cahn⁹¹, já mostrados, o valor de n refere-se ao modo de nucleação, ou seja se nos pontos tríplices, arestas ou superfícies do grão. Se este valor for suposto constante durante a transformação, implicitamente está sendo considerado que o modo de nucleação não varia, o que normalmente não é verdade. Diversos resultados experimentais indicaram que n situa-se entre 0,5 e 1,5 para a formação da ferrita^{8,9,54,112-113,138,144-147}. Se n for constante durante toda a transformação, b pode ser expresso em função da temperatura, além de eventualmente da fração transformada, tamanho de grão inicial e composição química, que a transformação ainda vai ser aditiva pelos critérios mostrados nas equações (3.20) e (3.21). Lee¹⁴⁵ teve a preocupação em observar a validade da regra da aditividade, mas verificou que a expressão de n em função da evolução da fração transformada melhor representaria os dados experimentais, além de não comprometer tal validade. Além disso, tal

modelamento foi interpretado fisicamente como mudanças de modos de nucleação da ferrita. Campbell et al.⁸ expressaram n em função da composição química, enquanto que Han et al.^{10,146} incluíram o teor de C na austenita e o seu tamanho de grão inicial. Os procedimentos desses dois autores ainda satisfazem a validade de aplicação da regra da aditividade. Porém, nos casos em que n foi expresso em função da temperatura, como por Lee¹⁴⁵ e por Gomez e Pérez¹³², não se pode garantir tal validade.

No caso do modelamento do parâmetro b é mais comum que ele seja uma função da temperatura^{13,106,112,115,132,140}, embora possa também incluir a composição química¹⁰ e o tamanho de grão austenítico^{10,145}. Para todas essas possibilidades, a transformação é aditiva. Evidentemente, se o modelamento se refere a apenas um aço, não faz sentido incluir o efeito da composição química, exceto no caso do enriquecimento em C da austenita¹⁰. Se, ao invés da equação (3.25), for usada uma equação que já considere o efeito do tamanho de grão austenítico inicial, equação (3.17), o parâmetro b não precisará incluir este efeito. Este é o caso dos modelos desenvolvidos pela equipe de Militzer^{13,54,106,112-113}, que expressaram tal parâmetro, para um dado aço, em função apenas da temperatura, por uma expressão do tipo (3.26), onde A e B são constantes determinadas experimentalmente.

$$\ln b = A(Ae_3 - T) + B \quad (3.26)$$

Uma vez que os parâmetros A e B tenham sido parametrizados, a cinética de transformação em resfriamento contínuo pode ser dada por uma expressão do tipo (3.27), onde $\phi(T')$ é a taxa instantânea de resfriamento¹³.

$$X = X_e \left\{ 1 - \exp \left[\frac{1}{d\gamma^m} \left(\int_{Ar_3}^T \frac{\exp((A(Ar_3 - T') + B)/n)}{\phi(T')} dT' \right)^n \right] \right\} \quad (3.27)$$

Alternativa, e mais comumente^{8,9}, pode-se usar um procedimento numérico onde a fração transformada é obtida pela soma de incrementos, como a seguir.

Seja s o número de pontos da curva de transformação obtida, caracterizada pelos valores de temperatura, T , tempo, t , e fração transformada total, X . Num ponto i da transformação (T_i, t_i, X_i) , o tempo que seria necessário para a transformação evoluir, em condições isotérmicas, até a fração X_i , é dado pela equação (3.28). Esse tempo é chamado tempo virtual, uma vez que a transformação efetivamente não é isotérmica.

$$tv_i = \left[\frac{1}{b(T_i)} \ln \left(\frac{1}{1 - X_i} \right) \right]^{1/n} \quad (3.28)$$

O termo $b(T_i)$ é dado por (3.29), admitindo-se que b seja modelado pela expressão (3.26).

$$b(T_i) = \exp[A(Ae_3 - T_i) + B] \quad (3.29)$$

O incremento de tempo, Δt_i , para o próximo ponto da transformação $i+1$ é dado em (3.30).

$$\Delta t_i = t_{i+1} - t_i \quad (3.30)$$

No tempo $i+1$, esse incremento é adicionado ao tempo virtual tv_i , para o cálculo da fração transformada empregando-se a equação (3.25), que fica escrita como em (3.31).

$$X_{i+1} / X_e = 1 - \exp \left[- b(T_{i+1})(tv_i + \Delta t_v)^n \right] \quad (3.31)$$

A aplicação sucessiva das equações de (3.28) a (3.31) ao longo do percurso da transformação permite o cálculo da curva de transformação em resfriamento contínuo, em função do equacionamento para a transformação isotérmica, desde que A , B e n sejam conhecidos.

As principais vantagens da aplicação do modelamento pela equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade são sua simplicidade, o que a torna aplicável aos processos industriais, e seu bom ajuste à maioria das transformações, com a ressalva de que, às vezes, têm-se que restringir muito os intervalos de modelamento de A e B . A

desvantagem é ser um modelo semi-empírico, onde não se consegue uma interpretação física de b e n .

3.8.3. Formulação da transformação através de equações de migração de interface

A transformação de fase é caracterizada pelo avanço da interface para a região não transformada. Então, uma das formas de seu modelamento é descrever a velocidade de migração dessa interface. Para o caso de controle por difusão, ocorre um acúmulo de soluto à frente da interface, mantendo-se uma condição de equilíbrio termodinâmico, e a força motriz para a transformação depende do gradiente de concentração do soluto em direção à região não transformada. A mudança de estrutura cristalina na interface é considerada instantânea nesse caso.

Se a transformação é controlada por reações na interface de transformação, ao invés do controle por difusão, a velocidade de migração da interface, v , é dada pela equação (3.32)²¹. O termo multiplicativo M é a mobilidade da interface, que depende de diversos fatores, tais como o tipo de mudança de estrutura cristalina, a presença de elementos em solução sólida e precipitados. A força motriz para a transformação, $\Delta G^{\gamma\alpha}$, é dada pela variação de energia livre entre a austenita e a ferrita.

$$v = M\Delta G^{\gamma\alpha} \quad (3.32)$$

Baseando-se na premissa de que a transformação da austenita para ferrita seja controlada pela migração da interface, Krielaart e van der Zwaag¹⁵⁰, desenvolveram uma formulação para descrever matematicamente tal reação em ligas Fe-Mn. A escolha dessa liga foi devida à ausência de C, o que definitivamente excluiria o controle por difusão do C. A expressão (3.33) mostra a equação básica utilizada, sendo que a mobilidade foi descrita pela multiplicação de um termo pré-exponencial, M_0 , chamado de mobilidade intrínseca, e uma expressão tipo Arrhenius. Utilizando-se resultados laboratoriais sobre o estudo da transformação em calorímetro, o valor da energia de ativação Q_M obtido foi de 140 kJ/mol e o valor de M_0 foi de 1,58 mm.mol.J⁻¹.s⁻¹.

$$v = M_0 \exp\left(-\frac{Q_M}{RT}\right)\Delta G^{\gamma\alpha} \quad (3.33)$$

Posteriormente, este tipo de formulação foi aplicado por Qiu et al.⁵⁹ e por Kop et al.¹⁵¹ para modelamento da transformação da austenita em ferrita em aços baixo carbono. Kop et al.¹⁵¹ argumentam que em aços baixo C a difusão perde importância para o controle da reação, sendo que para teores abaixo de 0,02%C não há necessidade de partição, uma vez que a ferrita acomoda todo esse C. Porém, enfatizam que o controle da reação somente por migração da interface não deve ser o mais adequado para aços com maiores teores de C. Para esses aços, seria mais correto um modelo misto, ou seja, que leve em conta tanto a migração da interface quanto a difusão do C. A mesma conclusão foi colocada por Qiu et al.⁵⁹. Como a equação básica dos modelos de migração da interface fornece a velocidade de seu avanço, é necessário incorporar ainda modelos geométricos que incluem o local de nucleação da ferrita e a forma geométrica da austenita e da ferrita. No caso da austenita, sempre foi considerada a forma do tetracadaedro. Outra característica do modelo, adotada em todas as formulações da equipe de pesquisadores, é que a nucleação foi considerada instantânea, numa determinada temperatura. Ou seja, para o cálculo da cinética, somente a etapa de crescimento da ferrita foi levada em conta.

Em trabalhos subsequentes, Hanlon et al.^{152,153} ampliaram a aplicação do modelo de migração da interface para a transformação da austenita em ferrita em aços CMn submetidos a deformação logo antes da transformação. O objetivo foi verificar o efeito da deformação na cinética de transformação desses aços usando-se tal tipo de modelo. A modificação básica do modelo foi a introdução de um termo para contabilizar o efeito da deformação aplicada na força motriz para transformação. No primeiro trabalho dos autores, foi usado simplesmente um coeficiente multiplicativo para esse termo. No trabalho posterior, foi usado um termo adicional ao da energia livre química, conforme equação (3.34). Este termo, denominado $\Delta G_{\text{def.}}$, é a variação de energia livre devido à deformação, e foi descrito em função de parâmetros tais como o tamanho de sub-célula e a densidade de deslocamentos. A energia associada à deformação eleva as temperaturas de equilíbrio. A conclusão principal dos trabalhos de Hanlon et al.^{152,153} é que a deformação da austenita acelera a transformação via aumento da taxa de nucleação e que este efeito é traduzido na elevação da temperatura de início de transformação. Porém, a temperatura de final de transformação não foi alterada significativamente.

$$\Delta G^{\gamma\alpha} = \Delta G_{\text{quím.}} + \Delta G_{\text{def.}} \quad (3.34)$$

Em trabalho posterior realizado pelo mesmo grupo de pesquisa, van Leeuwen et al.⁶³ aplicaram o modelo de migração da interface para condições de resfriamento super-rápidas, com taxas entre 105°C/s e 600°C/s. Os autores afirmam que a principal vantagem do modelo de migração da interface em relação à formulação por equações de Avrami é que o primeiro permite tratar condições de transformação para um caminho temperatura-tempo variável, ao contrário do segundo.

Militzer¹⁰⁶ comenta que a aplicação dos modelos de transformação adotando-se o controle pela reação da interface não foram satisfatórios em simulações feitas e, da mesma forma que Kop et al.¹⁵¹, conclui que um modelo misto seria o mais adequado. Em trabalho mais recente, Inden e Hutchinson⁴⁵ mostram que os valores de M_0 a 700°C determinados por Hillert, de $6,4 \cdot 10^{-5}$ (m.mol.J⁻¹.s⁻¹), e por Krielaart e van der Zwaag¹⁵⁰, de $1,8 \cdot 10^{-9}$ (m.mol.J⁻¹.s⁻¹), diferem de cinco ordens de grandeza. Portanto, foi lançada uma grande dúvida sobre o cálculo dos termos da velocidade de migração da interface até então usados. Inden e Hutchinson⁴⁵ propõem, então, também a aplicação de um modelo misto de controle da transformação.

Uma análise crítica dos modelos de transformação baseados no controle da reação pela migração da interface indica limitações de sua aplicação para propósitos de elaboração de modelos integrados de transformação, devido a: (i) somente a transformação para ferrita ter sido modelada; (ii) não haver concordância muito boa entre resultados teóricos e determinações experimentais; (iii) incerteza na determinação de parâmetros relacionados à mobilidade da interface, conforme comentado no parágrafo anterior; e (iv) os modelos tratarem somente a cinética de transformação, mas não modelarem as temperaturas de início de formação de cada fase nem o tamanho de grão ferrítico.

3.8.4. Formulação de Suehiro

Suehiro et al.^{7,82} desenvolveram modelos matemáticos para previsão da transformação de aços CMn durante resfriamento contínuo, após a laminação a quente, considerando-se a possibilidade de formação dos constituintes ferrita, perlita e bainita. Os modelos desenvolvidos podem ser considerados como semi-empíricos, pois partindo-se de equações teóricas fundamentais, foram introduzidos coeficientes determinados

experimentalmente em ensaios dilatométricos. A razão para não usar a formulação da equação de Avrami/regra da aditividade, apontada pelos autores, é que os dados de transformação isotérmica para aços CMn podem não ser confiáveis, uma vez que a transformação é muito rápida. Assim, na sua opinião é desejável um modelo que possa calcular a transformação diretamente das condições de resfriamento contínuo.

Foi modelada a cinética de transformação da austenita, considerando-se a nucleação e o crescimento das fases, e o tamanho de grão ferrítico. O modelo desenvolvido inicialmente para aços baixo carbono foi estendido para aços alto C^{81,84} e para a transformação a partir da austenita deformada⁸⁰. Os objetivos finais dos modelos desenvolvidos foram a previsão das propriedades mecânicas finais dos aços laminados a quente^{80,81,84} e a melhoria do controle de processo. Com relação à previsão das propriedades mecânicas, os modelos de transformação foram inseridos em modelos globais de previsão do comportamento metalúrgico dos aços durante a laminação a quente e, subsequentemente, durante o resfriamento contínuo e após bobinamento. O enfoque no controle do processo de resfriamento foi enfatizado quando o modelo foi aplicado aos aços de alto C, uma vez que o calor liberado na transformação destes aços é elevado.

Uma síntese das características dos modelos desenvolvidos é apresentada a seguir, seguindo-se a seqüência natural da transformação, a qual envolve a temperatura de início de transformação e a cinética de transformação.

Para o início da transformação, a equipe de Suehiro^{7,82} considera o momento quando a temperatura do material atinge a linha Ae₃, em resfriamento contínuo.

A cinética de transformação envolve dois aspectos, a nucleação e o crescimento da fase formada. Para a nucleação, foi utilizada a equação (3.5), a qual é repetida em (3.35), ajustando-se a terminologia usada, onde: k_i é uma constante determinada experimentalmente; J é a freqüência de nucleação e ΔG_v é a diferença de energia livre entre austenita e o constituinte em consideração.

$$J = T^{-1/2} D_c \cdot \exp\left(-\frac{k_i}{RT\Delta G_v^2}\right) \quad (3.35)$$

O valor de ΔG_v foi calculado a partir da base de dados termodinâmicos de Uhrenius⁵⁸. O coeficiente de difusão do C, D_C , depende da temperatura e da composição da austenita. Expressões adequadas para cálculo de D_C podem ser obtidas na literatura, por exemplo dados por Ägren¹⁵⁴ e por Kaufman et al.³¹. A equipe de Suehiro^{7,82} usou os dados dos últimos autores.

Para calcular a velocidade de crescimento, G , da nova fase foi usada a equação de Zener-Hillert, dada em (3.8). Tanto esta quanto a equação para a frequência de nucleação foram deduzidas para condições isotérmicas.

A concentração $C_{\gamma\alpha}$ dada naquela equação foi calculada a partir de dados termodinâmicos, considerando-se a variação de energia livre entre austenita e ferrita, e os efeitos dos elementos Mn e Si. A concentração de C na austenita aumenta com a evolução da transformação. Realizando-se um balanço de massa da distribuição do C entre as fases, a sua concentração, C_γ , em cada instante pode ser calculada pela equação (3.36), onde X_F é a fração formada de ferrita.

$$C_\gamma = \frac{C_0 - X_F C_\alpha}{1 - X_F} \quad (3.36)$$

A formação da perlita ocorre nas interfaces austenita/ferrita. No trabalho inicial, os autores^{7,82} considerou a transformação para perlita como sendo apenas por crescimento, mas, mais tarde, encontrou que resultados experimentais se ajustavam melhor à condição de nucleação e crescimento. A equação (3.37) foi usada para cálculo da velocidade de crescimento, onde: ΔT é o super-resfriamento abaixo de A_1 e $C_{\gamma\beta}$ é a concentração de C no contorno cementita/austenita.

$$G_P = \Delta T \cdot D (C_{\gamma\alpha} - C_{\gamma\beta}) \quad (3.37)$$

A cinética de transformação depende, assim, das taxas de nucleação e crescimento. Para desenvolvimento das equações da cinética, os autores^{7,82} usaram as formulações teóricas desenvolvidas por Cahn⁹¹ para a transformação isotérmica, as quais consideram as taxas de nucleação e crescimento de cada fase. A velocidade de nucleação, N , é dada pelo

produto da frequência de nucleação, J , pela área de nucleação por unidade de volume da austenita, S_v , equação (3.38).

$$N = J.S_v \quad (3.38)$$

Substituindo-se (3.38) em (3.9), obtém-se:

$$X = 1 - \exp\left(-\frac{\pi}{3} J S_v . G^3 . t^4\right) \quad (3.39)$$

Fazendo-se a derivação em relação ao tempo, tem-se:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{4\pi}{3} t^3 (J S_v) . G^3 \exp\left[-\frac{\pi}{3} (J S_v) G^3 t^4\right] \quad (3.40)$$

Extraindo-se a variável tempo, t , da equação (3.40), tem-se:

$$t = \left[\ln \frac{1}{1-X} \right]^{1/4} \left[\frac{3}{\pi (J S_v) G^3} \right]^{1/4} \quad (3.41)$$

Substituindo-se t na equação (3.40), chega-se à velocidade de transformação:

$$\frac{dX}{dt} = 4,046 (J S_v)^{1/4} G^{3/4} \left[\ln(1/(1-X)) \right]^{3/4} (1-X) \quad (3.42)$$

No caso de cinética de transformação governada pela saturação de sítios, considerados como o contorno de grão da austenita, a aplicação do mesmo procedimento acima à equação (3.14) resulta na seguinte equação para descrever a velocidade de transformação:

$$\frac{dX}{dt} = 2 S_v G (1-X) \quad (3.43)$$

Nas equações (3.42) e (3.43), a velocidade de transformação, dX/dt , foi escrita em função apenas de constantes dependentes da temperatura e do estado da transformação, não incluindo o tempo. Isto indica que, matematicamente, estas equações satisfazem a condição isocinética, possibilitando o emprego da regra da aditividade quando utilizadas para calcular transformações em resfriamento contínuo.

Para a formação da ferrita proeutetóide, considera-se que os sítios de nucleação são principalmente as superfícies do grão austenítico. Num período inicial, a transformação ocorre por nucleação e crescimento, dada pela equação (3.42) e, quando se completa a saturação de sítios, a transformação prossegue por crescimento apenas, dada pela equação (3.43). Praticamente, considera-se essa transição quando a velocidade de transformação calculada pela equação (3.43) ultrapassa aquela calculada pela equação (3.42).

A velocidade de formação da perlita é calculada pela equação (3.37).

A cinética de transformação para a bainita^{80,81,84} foi considerada de forma similar à ferrita, mas governada apenas pelo crescimento do novo constituinte, a partir das interfaces austenita/ferrita.

O valor da área por unidade de volume, S_v , nas equações acima, possui dois significados distintos, equação (3.44). Para a nucleação da ferrita, S_v incorpora além da área de contorno do grão poligonal, a área devido à deformação do grão e devido às bandas de deformação. Por isso, é utilizado o valor de 4 para r na equação (3.44). Porém, para as transformações da perlita e da bainita, S_v significa a área de contorno de grão poligonal da austenita, e, portanto, o valor de r é 1.

$$S_v = 6 / d\gamma^r \quad (3.44)$$

Alguns pesquisadores^{5,61,86,87} adotaram a formulação desenvolvida por Suehiro, calibrando vários parâmetros através de experiências.

Pode-se apontar diversas desvantagens da possível aplicação da formulação de Suehiro para modelamento da transformação de aços microligados ao Nb, objetivo deste estudo.

Inicialmente, tal formulação foi aplicada somente para aços CMn. Os cálculos da cinética de transformação são bastante complexos uma vez que parâmetros, tais como a força motriz da transformação, o coeficiente de difusão do C na austenita e as concentrações de equilíbrio, a cada temperatura durante o resfriamento contínuo, precisam ser calculados em uma rotina computacional. O número de parâmetros experimentais também é relativamente grande. Além disso, não foram fornecidos em nenhum dos trabalhos dos autores, exemplos de curvas dilatométricas e da cinética de transformação obtidas, o que dificultaria a comparação de resultados de modelos.

3.8.5. Formulações desenvolvidas por Kirkaldy

Kirkaldy et al.^{68,155,156} desenvolveram uma série de formulações para prever a cinética de transformação da austenita em ferrita, perlita e bainita, em condições isotérmicas, baseando-se em conceitos de Zener e Hillert. As equações foram para transformações difusionais em aços de médio e alto teor de C, com adições de elementos de liga. As expressões desenvolvidas são capazes de reproduzir os diagramas TTT para esses aços. Aliando-se essas expressões à regra da aditividade, Kirkaldy et al.^{68,155,156} mostraram sua aplicabilidade na previsão de transformações em resfriamento contínuo. Este tipo de formulação foi utilizado por vários pesquisadores^{22,57,157,158} no modelamento das transformações para ferrita, perlita e bainita, e para formulação de expressões para cálculo do tempo de início de transformação na condição isotérmica^{22,61,119}.

Para cálculo do tempo de início de transformação, $\tau(x,T)$, expressões do tipo (3.45) foram desenvolvidas por Kirkaldy et al.^{68,155,156}, onde $F(CQ)$ é uma função da composição química do aço; A o tamanho de grão austenítico ASTM; s é um coeficiente relacionado ao mecanismo de difusão, $s = 3$ para difusão em volume e $s = 2$ para difusão no contorno de grão; e β um coeficiente experimental, dependente da fase formada. Li et al.⁵⁷ realizaram adaptações da equação original de Kirkaldy et al. para aplicação a aços microligados ao Nb.

$$\tau(x, T) = \frac{F(CQ)}{2^{\beta A} \Delta T^s \exp(-Q_D / RT)} S(x) \quad (3.45)$$

O termo $S(x)$ é relacionado ao efeito sigmoideal da transformação, que é dado por (3.46).

$$S(x) = \int_0^x \frac{dx}{x^{2(1-x)/3} (1-x)^{2x/3}} \quad (3.46)$$

Expressões de $F(CQ)$ e valores de Q_D para a formação da ferrita, perlita e bainita são dados nos originais de Kirkaldy et al.^{68,155,156} e nos trabalhos de Pan²² e de Li et al.⁵⁷, este último mostrando ligeiras adaptações nas mesmas.

Aplicando-se na equação (3.45) um pequeno valor para x , que corresponda ao início da transformação, por exemplo, 0,01, pode-se prever o tempo de início da transformação.

A velocidade de transformação em resfriamento contínuo pode ser prevista, derivando-se a expressão (3.45) em relação ao tempo, o que resulta em (3.47).

$$\frac{dX}{dt} = \frac{2^{\beta_A} \Delta T^s \exp(-Q/RT) x^{2(1-x)/3} (1-x)^{2x/3}}{F(CQ)} \quad (3.47)$$

Com isso, a evolução da fração transformada em resfriamento contínuo pode ser calculada em qualquer instante, conhecendo-se a composição química, o tamanho de grão inicial, a temperatura e as constantes experimentais, fazendo-se a integração da equação (3.47).

$$X = \int_0^x dx = \int_0^t \frac{2^{\beta_A} \Delta T^s \exp(-Q_D/RT) x^{2(1-x)/3} (1-x)^{2x/3}}{F(CQ)} dt \quad (3.48)$$

A vantagem da formulação de Kirkaldy é sua relativa simplicidade. Como limitações, essa formulação foi desenvolvida para aços médio e alto C, com adições de elementos de liga, não tendo sido testada para aços baixo carbono e alta resistência. Outro aspecto limitador é que a função $F(CQ)$ e as constantes de suas equações foram obtidas da compilação de diagramas TTT publicados para os aços citados e, portanto, não seria imediata a obtenção de expressões adequadas para outros tipos de aços, se for possível.

3.8.6. Outras formulações encontradas na literatura

Nos itens de 3.8.2 a 3.8.5 foram apontadas as principais formas de modelamento matemático da transformação da austenita, que puderam ser agrupadas segundo a aplicação por vários autores. Muitas outras formas de modelamento têm sido citadas na literatura, mas na maioria das vezes, para uma condição específica, por exemplo transformação apenas para um constituinte, transformação isotérmica, ou uma formulação muito complexa.

A equipe de pesquisa liderada por Pietrzyk^{61,119,159} tem atuado no modelamento da transformação da austenita para ferrita, perlita e bainita. Para a formação da ferrita, foram usadas as formulações de Suehiro et al.⁶ de nucleação, crescimento e saturação de sítios, com ligeiras modificações. Para a perlita e a bainita, foram determinadas expressões semi-empíricas, baseando-se em conceitos de Kirkaldy et al.^{155,156} para o tempo de início de transformação, τ_p , conforme exemplo para a perlita, equação (3.49), onde a_9 , a_{10} , a_{11} e k_p são constantes determinadas experimentalmente.

$$\tau_p = \frac{a_9 k_p}{(Ae_1 - T)^{a_{11}}} \exp\left(\frac{a_{10} \cdot 10^3}{RT}\right) \quad (3.49)$$

A cinética de transformação foi modelada por equações do tipo Avrami, em função da temperatura, equação (3.50), onde X_p é a fração transformada de perlita, e a_{14} , a_{15} , e b_p são constantes determinadas experimentalmente.

$$X_p = 1 - \exp\left[-\frac{b_p}{d\gamma^{a_{14}}}(t - \tau_p)^{a_{15}}\right] \quad (3.50)$$

Percebe-se que existe uma quantidade muito grande de coeficientes que precisam ser determinados experimentalmente nas formulações de Pietrzyk et al. Isso acarreta a necessidade de uma quantidade muito grande de experiências, o que limita a aplicação do método, por exemplo se forem consideradas variações de composição química dos aços.

Umamoto et al.⁸⁸ propuseram uma formulação teórica geral para um modelo de transformação da austenita de forma seqüencial em ferrita, perlita, bainita e martensita. A formulação é bastante complexa e considerada para a condição isotérmica. Adicionalmente, não foi mostrada aplicação da formulação. Somente Miettinen⁶⁵, entre a literatura consultada, fez uso da equação desse autor para o modelamento da transformação da austenita para ferrita.

Também Yoshie et al.⁸⁵ apresentaram um modelo global de evolução microestrutural, incluindo as transformações para ferrita, perlita e bainita. A formulação é voltada para o processo de laminação a quente de chapas grossas, de modo que a possibilidade de formação de ferrita no interior do grão austenítico (idiomórfica) é considerada, além da ferrita normal de contorno de grão (alotrimórfica). Porém, a formulação é muito complexa e foi apresentada de uma forma muito geral, além de não terem sido fornecidas informações de procedimentos experimentais.

Em alguns estudos^{2,39,129,160}, equações do tipo Avrami foram aplicadas para o modelamento da transformação fornecendo a fração transformada diretamente em função da temperatura e/ou do tempo de transformação em resfriamento contínuo. Nesses estudos não houve nenhuma justificativa para tal aplicação, uma vez que a equação de Avrami foi desenvolvida apenas para a condição isotérmica.

Algumas formulações específicas, tais como a de Choo et al.¹⁶¹, são encontradas na literatura. Neste caso, foram realizadas diversas aproximações no desenvolvimento de uma equação que fornece a fração transformada diretamente a partir da composição química e da taxa de resfriamento, porém não foi considerado o efeito do tamanho de grão austenítico.

Militzer^{106,162} fez uma revisão geral sobre os desafios para o modelamento da transformação da austenita e apontou diversas questões ainda não resolvidas, tais como: formulação de modelos de transformação para a bainita, principalmente pelo fato de ainda haver controvérsia sobre seu mecanismo de formação; partição de solutos durante as transformações difusionais para ferrita e perlita e o desenvolvimento de modelos baseados em mecanismos, de tal forma que possam ser extrapolados em campo fora das condições experimentais.

Mais recentemente, o uso de técnicas de inteligência artificial, notadamente de redes neurais artificiais, tem ganhado terreno no modelamento da transformação da austenita^{163,164}. Apesar de promissoras, tais técnicas ainda estão em estágio inicial para este tipo de modelamento.

3.9 Modelamento do Tamanho de Grão Ferrítico

Num modelo de transformação da austenita é desejável a determinação do tamanho de grão ferrítico ($d\alpha$), uma vez que as propriedades mecânicas dependem diretamente de seu valor. De uma forma geral, o $d\alpha$ em um aço após resfriamento contínuo depende da condição inicial da austenita, em termos de tamanho de grão e da deformação retida, da composição química do aço e da taxa de resfriamento, TR.

Tamura et. al.^{92,165} postularam teoricamente que o $d\alpha$ é essencialmente determinado no início da transformação e deriva da quantidade de grãos de ferrita nucleados por unidade de volume da austenita, N_f , equação (3.51). Concluem, baseando-se em suas investigações, que o tamanho de grão ferrítico final é determinado basicamente pela taxa de nucleação, ou seja, não há efeito da etapa de crescimento do grão no tamanho final.

$$d\alpha \propto (1/N_f)^{1/3} \quad (3.51)$$

O conceito de Tamura et al.^{92,165} de que cada núcleo formado se transforma em um grão de ferrita foi utilizado por Suehiro et al.⁸⁰⁻⁸⁴ no desenvolvimento de suas formulações. Militzer et al.¹³ também afirmam que não existe crescimento significativo do grão ferrítico para aços microligados ao NbTi quando a temperatura de bobinamento é abaixo de 700°C.

No entanto, vários estudos^{123,78,166} têm concluído que a quantidade de grãos ferríticos na microestrutura final é menor que a quantidade de núcleos formados, ou seja, existe um efeito de coalescimento de núcleos durante o estágio de crescimento. Priestner e Hodgson¹²³ fizeram um estudo criterioso utilizando um aço CMn microligado ao Nb, transformado a partir da austenita deformada, e evidenciaram que muito mais grãos de ferrita são nucleados que o número de grãos final. Concluíram ainda que a

microestrutura final, em termos de quantidade de grãos ferríticos, não fica estabelecida antes da transformação completar 35%. Finalmente, apontam que existe um potencial muito grande de refinamento de grão pela deformação da austenita, desde que se encontre uma maneira de impedir o coalescimento dos núcleos nos estágios iniciais da transformação.

Independente do aspecto de coalescimento ou não dos grãos de ferrita, do ponto de vista fenomenológico, o que tem sido feito para o modelamento da transformação é o estabelecimento de equações, na maioria das vezes empíricas, que relacionam $d\alpha$ com as variáveis pertinentes. A seguir são mostradas diversas equações estabelecidas por pesquisadores.

Tamura et al.^{92,165}, considerando suas suposições teóricas citadas anteriormente, chegaram à equação teórica dada em (3.52) para prever $d\alpha$. Ao mesmo tempo, fazendo experimentos em um aço comercial com 0,15%C, obtiveram a equação (3.53), que se aproxima da (3.52), sendo $d\gamma$ dado em (μm), e TR em ($^{\circ}\text{C/s}$).

$$d\alpha \approx \text{TR}^{-0,19} d\gamma^{0,33} \quad (3.52)$$

$$d\alpha = 5,7\text{TR}^{-0,26} d\gamma^{0,46} \quad (3.53)$$

De acordo com Suehiro et al.⁸⁰⁻⁸⁴, o efeito da taxa de resfriamento pode ser incorporado através da temperatura Ar_3 , considerada quando se forma 5% de ferrita. A partir da equação experimental (3.54), obtida por esse autor para aços CMnSi, e aplicando-se o conceito definido em (3.51), foi determinada a equação (3.55) para cálculo de $d\alpha$, sendo F a fração final formada de ferrita. A utilização de Ar_3 , em vez da taxa de resfriamento, é vantajosa pois torna a equação passível de ser aplicada mesmo quando a taxa de resfriamento não é uniforme.

$$N_f = 3,47 \cdot 10^{-11} d\gamma^{-1,75} \exp(21430 / Ar_3) \quad (3.54)$$

$$d\alpha = [5,51 \cdot 10^{10} d\gamma^{1,75} \exp(-21430 / Ar_3) \cdot F]^{1/3} \quad (3.55)$$

A equação (3.55) é válida para a condição da austenita recristalizada. Para levar em consideração o efeito da deformação retida na austenita antes da transformação, foi aplicada a correção (3.56) ao tamanho de grão austenítico. Esta equação é válida para aços CMn, sendo $d\gamma^{\text{eff}}$ um valor de tamanho de grão austenítico “corrigido” para a austenita deformada e ρ é a densidade de deslocações, calculada pelo modelo de evolução do tamanho de grão austenítico, na condição da austenita deformada.

$$d\gamma^{\text{eff}} = d\gamma / (1 + 10^{-11} \rho^{1,154}) \quad (3.56)$$

Liu et al.⁸⁶ adotaram a mesma equação de Suehiro et al.⁸⁰⁻⁸⁴, alterando apenas o termo para considerar o efeito da deformação da austenita, através da densidade de deslocações, equação (3.57). As condições experimentais foram deformações entre 0,25 e 1 e velocidades de resfriamento de 1,6 a 13,5°C/s, em aços CMn baixo C, sendo ρ_0 a densidade de deslocações na condição da austenita recristalizada.

$$d\alpha = \left[1,22 \cdot 10^{10} d\gamma^{1,75} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{0,25} \exp(-21430 / Ar_3) \cdot F \right]^{1/3} \quad (3.57)$$

A equipe de pesquisa liderada por Militzer^{13,54,112,113} tem adotado uma formulação parecida com a de Suehiro et al.⁸⁰⁻⁸⁴ para cálculo de $d\alpha$, conforme equação (3.58), sendo E um parâmetro ajustado experimentalmente para cada aço.

$$d\alpha = [F \exp(B - E / Ar_3)]^{1/3} \quad (3.58)$$

Para a transformação da austenita a partir da condição recristalizada, B foi modelado pela expressão (3.59), com B_0 e q determinados experimentalmente para cada aço.

$$B = B_0 d\gamma^q \quad (3.59)$$

Existem algumas divergências entre esses coeficientes citados nos trabalhos publicados, de modo que a Tabela 3.3 mostra somente os coeficientes publicados na referência 13. Para os dados dessa tabela, o $d\gamma$ variou, considerando-se todos os aços, entre 18 e

260 μm , a taxa de resfriamento foi entre 1 e 250°C/s e a deformação aplicada entre 0 e 0,6.

Tabela 3.3 - Coeficientes das equações (3.58) e (3.59) determinados por Militzer¹³.

Aço	E	B ₀	q
Baixo C	51000	50,7	0,024
CMnV	51000	47,3	0,037
Microligado ao Nb somente	51000	49,6	0,036
Microligado ao Nb e Ti, com escoamento mínimo de 350 MPa	51000	50,7	0,037

Para os aços onde houve um efeito significativo da deformação retida na transformação, o valor de B foi escrito como uma função dessa deformação. Especificamente para o aço microligado ao NbTi da classe de limite de escoamento mínimo de 550 MPa, são mostradas diferentes equações para esse parâmetro nos trabalhos publicados^{13,114,115}.

Roberts¹⁶⁷ obteve a equação (3.60) para o cálculo do tamanho de grão ferrítico, para um aço médio C microligado ao Ti-V, onde o tamanho de grão original foi maior que 8 μm e as velocidades de resfriamento situaram-se entre 0,25 e 12°C/s.

$$d\alpha = 3,75 + 0,18d\gamma + 1,4TR^{-0,5} \quad (3.60)$$

Sellars e Beynon¹⁶⁸ propuseram as equações de (3.61) e (3.62) para previsão de $d\alpha$ em aços CMn e CMnNb, respectivamente. O tamanho de grão $d\alpha^0$ refere-se à condição da transformação a partir da austenita não deformada, que é corrigido para o caso de presença de deformação, de acordo com a equação (3.63). As condições de obtenção dessas equações não foram citadas. O parâmetro ε_c representa a deformação retida na austenita.

$$d\alpha^0 = 1,4 + 5,0TR^{-0,5} + 22[1 - \exp(-0,015d\gamma)] \quad (3.61)$$

$$d\alpha^0 = 2,5 + 3,0TR^{-0,5} + 20[1 - \exp(-0,015d\gamma)] \quad (3.62)$$

$$d\alpha = d\alpha^0 (1 - 0,45\varepsilon_c^{0,5}) \quad (3.63)$$

Para aços CMn, Anelli¹⁶⁹ propôs a equação (3.64) para o cálculo do tamanho de grão ferrítico.

$$d\alpha = 8,9d\gamma^{0,45} [1 - \exp(-0,075d\gamma)] TR^{-0,14} \quad (3.64)$$

Uma característica comum às diversas equações até aqui citadas é que elas não incorporam o efeito da composição química do material. Quando são considerados aços com variações significativas de composições químicas, é necessário que as equações levem em consideração este aspecto. Hodgson e Gibbs¹⁷⁰ propuseram as equações (3.65) e (3.66) para aços CMn, CMnV e CMnTi, baseando-se em adaptações da equação original proposta por Sellars e Beynon¹⁶⁸ e utilizando, também, a definição dada em (3.63). As condições de ensaios desses autores foram: $d\gamma$ de 20 a 40 μm , velocidades de resfriamento entre 0,4 e 3,2°C/s e deformação aplicada entre 0 e 2,5. Nestas equações, o efeito da composição química é obtido através do carbono equivalente, $C_{eq} = C + \text{Mn}/6$. De acordo ainda com Hodgson e Gibbs¹⁷⁰, quando a austenita está deformada, os efeitos do tamanho de grão e da composição química são pequenos, ao contrário dos aços CMn. Nos aços microligados ao Nb, existe uma complexa interação entre tamanho de grão austenítico, deformação retida e taxa de resfriamento.

$$d\alpha^0 = (-0,4 + 6,37C_{eq}) + (24,2 - 59,0C_{eq})TR^{-0,5} + 22,0[1 - \exp(-0,015d\gamma)] \quad (3.65)$$

para $C_{eq} < 0,35$, onde $C_{eq} = C + \text{Mn}/6$.

$$d\alpha^0 = (22,6 - 57,0C_{eq}) + 3TR^{-0,5} + 22,0[1 - \exp(-0,015d\gamma)] \quad (3.66)$$

para $C_{eq} \geq 0,35$.

Bengochea et al.¹¹¹ fizeram uma análise crítica das equações desenvolvidas por Sellars e Beynon¹⁶⁸ e por Hodgson et al.^{1,170} para aços microligados ao Nb e mostraram que somente em determinadas faixas de tamanho de grão austenítico inicial e valor de

deformação aplicada tais equações fornecem valores coerentes com as determinações experimentais. Nas outras condições, as equações superestimam o $d\alpha$. Assim, os autores propuseram a equação (3.67) para previsão do $d\alpha$ em aços ao Nb, resfriados rapidamente após processamento termomecânico.

$$d\alpha = (1 - 0,5\varepsilon_c^{0,47}) [4,5 + 3,0TR^{-0,5} + 13,4(1 - \exp(-0,15d\gamma))] \quad (3.67)$$

Kvackaj e Mamuzic¹⁰² estudaram a transformação da austenita em aços microligados ao Nb, focando a condição prévia da austenita no grão ferrítico. Estes pesquisadores chegaram à expressão (3.68) para prever $d\alpha$, através de regressão estatística com os dados obtidos.

$$d\alpha = 1,2919TR^{-0,1618} d\gamma^{0,4364} \varepsilon_c^{-0,3675} \quad (3.68)$$

Priestner e Al-Badri⁷⁸ acharam que a expressão (3.69), para aços CMnNb transformados a partir da austenita deformada, é a que melhor representou os dados experimentais, onde $d\alpha_0$ é dado pela equação (3.61) e a é uma constante experimental.

$$1/d\alpha = 1/d\alpha_0 + a\varepsilon_c^{2/3} \quad (3.69)$$

Para a austenita submetida à deformação retida após a transformação, as equações obtidas por Choquet¹⁷¹ e Saito³ são dadas em (3.70) e (3.71), respectivamente.

$$d\alpha = (5,76 - 10\%C - 1,3\%Mn)TR^{-0,175} d\gamma^{0,4-0,25\varepsilon} \quad (3.70)$$

$$\ln d\alpha = 0,92 + 0,44 \ln d\gamma - 0,77 \ln TR - 0,88 \tanh(10\varepsilon_c) \quad (3.71)$$

Phaniraj¹⁷² fez uma análise detalhada da aplicação de diversas equações para o cálculo de $d\alpha$ em aços C-Mn em condições usuais de resfriamento na linha de tiras a quente, e verificou que há uma grande dispersão entre os valores calculados, que podem variar de um fator de até quatro. O autor conclui que $d\alpha$ é mais sensível à deformação retida na austenita que à taxa de resfriamento e ao tamanho de grão inicial. Existe também um limite de $d\alpha$ à medida que decrescem a deformação retida e a taxa de resfriamento.

Choo e Choo¹⁶¹ fizeram regressão estatística com os dados de tamanho de grão ferrítico em 16 aços CMn ensaiados em laboratório, com taxas de resfriamento entre 0,5 e 30°C/s, chegando à equação (3.72), onde T_{mf} é a temperatura média de transformação (50% de transformação).

$$d\alpha = 7,32 \cdot 10^{-17} d\gamma^{0,442} TR^{0,65} T_{mf}^{5,858} \quad (3.72)$$

Santos et al.¹⁷ fizeram uma comparação dos resultados fornecidos por diversas equações de literatura, comparando-os aos seus resultados experimentais para vários aços CMn, e verificaram que as equações gerais, tais como a de Hodgson e Gibbs¹⁷⁰ e Militzer et al.¹³, foram as que forneciam melhor aderência aos resultados experimentais. Ainda assim, foram feitos ajustes nessas equações, que ficaram da forma mostrada em (3.73) e (3.74). Em ambas as equações, o efeito da composição química está implícito, ou através do carbono equivalente, C_{eq} , na primeira equação, ou através da temperatura Ar_3 , na segunda.

$$d\alpha = -0,4 + (24,2 - 55C_{eq})TR^{-0,04} + 22,0[1 - \exp(-0,012d\gamma)] \quad (3.73)$$

$$d\alpha = \left\{ F \exp \left[53d\gamma^{0,013} - 50825 / (Ar_3 + 273) \right] \right\}^{1/3} \quad (3.74)$$

Todas as equações mostradas anteriormente são válidas para o resfriamento contínuo, numa taxa aproximadamente constante, até o final da transformação. No processo industrial de laminação a quente, a tira é bobinada em uma temperatura que pode ser superior à de final de transformação. Com o bobinamento, a taxa de resfriamento reduz-se drasticamente, de forma que o tamanho de grão ferrítico pode não ser corretamente previsto pelas equações dadas.

Andofer et al.¹⁶⁶ comentam que para a temperatura de bobinamento em torno de 600°C, a transformação já se completou em aços CMn. Entretanto, o grão ferrítico cresce nessas temperaturas, sendo o tamanho de grão crescido dado pela expressão obtida para o Fe puro, equação (3.75), sendo $d\alpha_i$ o tamanho de grão obtido pela transformação em resfriamento contínuo (μm) e t o tempo decorrido após o bobinamento.

$$d\alpha^{3,5} = d\alpha_i^{3,5} + 6.10^8 t. \exp(-125500/RT) \quad (3.75)$$

Donnay et al.¹¹⁵ modelaram a transformação da austenita em aços CMn nas condições de processamento industrial. No caso da transformação a partir da austenita recristalizada, a equação para $d\alpha$ foi a citada em (3.76), sendo $C_{eq} = C + Mn/6$.

$$d\alpha = (13 - 0,73C_{eq}^{0,45}) d\gamma^{0,3} TR^{-0,15} \quad (3.76)$$

Se existe deformação da austenita antes da transformação, o expoente de $d\gamma$ é alterado, conforme equação (3.77).

$$d\alpha = (13 - 0,73C_{eq}^{0,45}) d\gamma^{0,3-0,2\varepsilon_c^{0,5}} TR^{-0,15} \quad (3.77)$$

As equações (3.76) e (3.77) são válidas quando a transformação se completa antes do bobinamento, ou seja para baixas temperaturas de bobinamento. Neste caso, o valor de $d\alpha$ na equação (3.77) é chamado de $d\alpha_1$. Se a temperatura de bobinamento for maior que a temperatura de início de transformação, $d\alpha$ não é mais função da taxa de resfriamento, e seu valor é dado pela equação (3.78).

$$d\alpha = (13 - 0,73C_{eq}^{0,45}) d\gamma^{0,3-0,2\varepsilon^{0,5}} \quad (3.78)$$

Para temperaturas de bobinamento intermediárias, entre o início e o final da transformação, é feita uma média ponderada entre as equações (3.77) e (3.78), com os pesos representados pelas frações transformada e não transformada, respectivamente.

Diante da grande quantidade de equações apresentadas na literatura para o cálculo do tamanho de grão ferrítico, torna-se relevante fazer uma análise em termos das variáveis consideradas e das faixas de validade, visando escolha do tipo de equação mais adequada para a consecução do objetivo de prever o tamanho de grão ferrítico final na laminação industrial de tiras a quente de aços.

3.10 Procedimentos Experimentais Utilizados na Literatura para Estudo da Transformação da Austenita em Resfriamento Contínuo

O objetivo desse item é fazer uma síntese dos principais estudos encontrados na literatura sobre a transformação da austenita e seu modelamento. São focalizados os procedimentos experimentais, os aços estudados e os resultados e/ou conclusões buscados e obtidos. Essa síntese é muito importante para se ter uma visão crítica das metodologias utilizadas, permitindo a definição do procedimento experimental empregado nesse trabalho. Para facilitar a comparação, foi construída a Tabela 3.4 com a síntese das informações obtidas.

Conforme colocado anteriormente, a transformação da austenita depende da sua condição microestrutural prévia, em termos de tamanho de grão, grau de deformação, densidade de deslocações e distribuição de inclusões. Logo, no caso de desenvolvimentos de modelos matemáticos objetivando sua aplicação industrial, é necessário que tais variáveis da austenita sejam levadas em consideração nos ensaios laboratoriais. Assim, é altamente desejável a utilização de uma técnica de simulação laboratorial do processo de conformação a quente, que possa ser aplicada antes do resfriamento contínuo, quando ocorre a transformação da austenita.

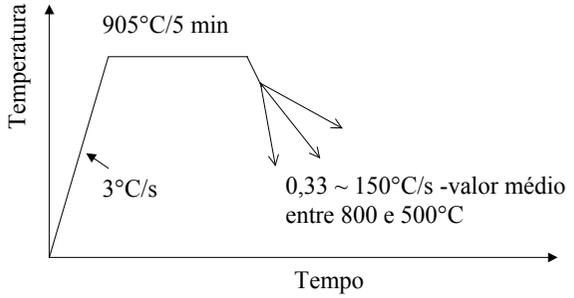
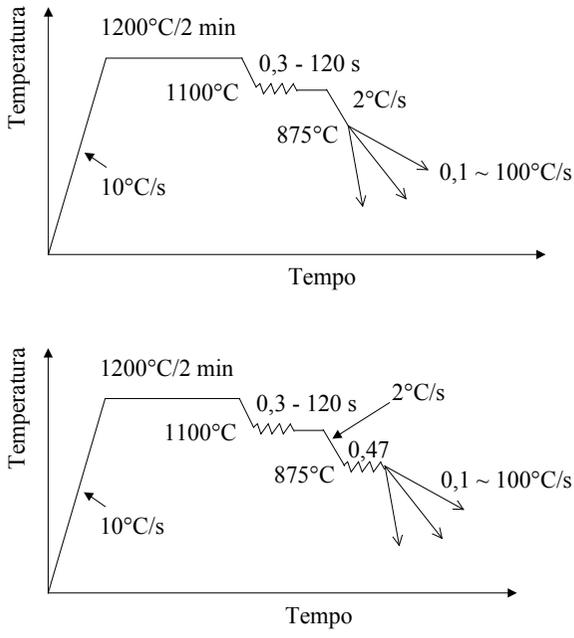
A técnica de deformação a quente que permite a maior aproximação da condição industrial é por ensaios de torção. Contudo, a deformação imposta nesses ensaios ao longo do raio do corpo-de-prova varia do seu centro para a periferia. Isso cria uma séria restrição à sua utilização para os estudos de transformação de fase, pois a cinética de transformação vai variar ao longo do raio do corpo-de-prova, onde é medida a variação dimensional. Portanto, em cada instante, a leitura da dimensão vai representar uma soma de efeitos de diferentes valores de deformação. O início da transformação, por exemplo, vai variar ao longo do raio, impossibilitando sua precisa determinação a partir da curva dilatométrica. Dessa forma, ensaios de torção antes do resfriamento não são adequados para o estudo da cinética de transformação. Somente no caso em que os resultados do estudo sejam limitados ao tamanho de grão final e à fração transformada é que tal técnica pode ser utilizada. Essa conclusão está de acordo com as informações apresentadas na Tabela 3.4 Quando o objetivo foi modelar a cinética de transformação, apenas deformação por compressão foi usada; quando o objetivo foi somente avaliar o

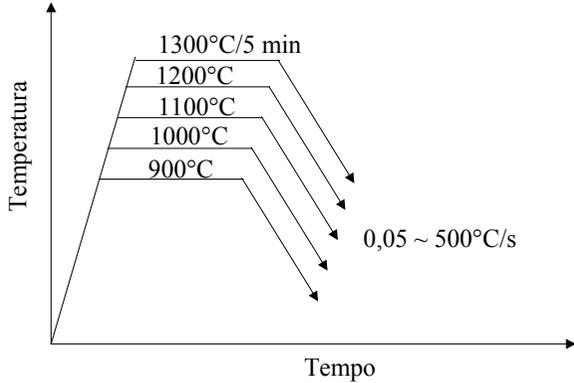
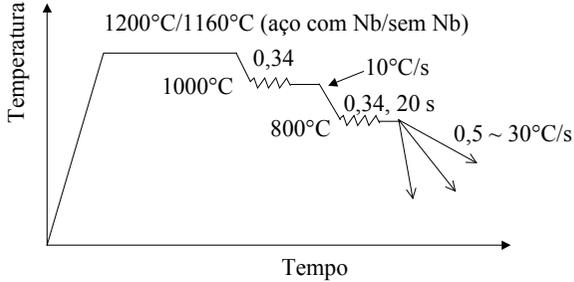
efeito de parâmetros no tamanho de grão e na microestrutura final, houve utilização de deformação por torção.

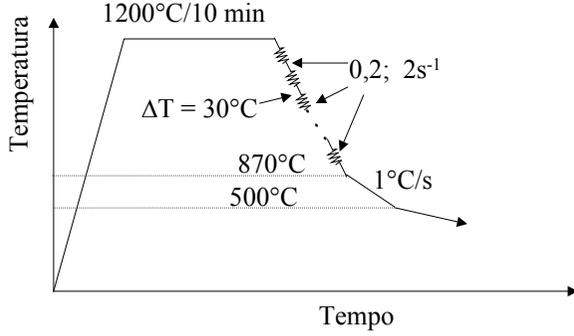
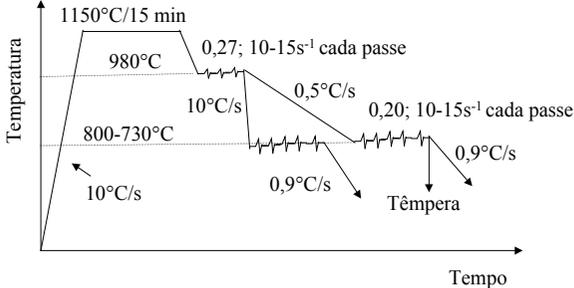
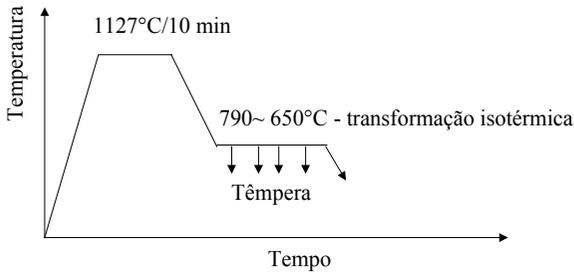
Outro aspecto importante que se conclui da Tabela 3.4 é que, embora existam muitos estudos voltados para a transformação da austenita em resfriamento contínuo, poucos têm o objetivo de modelamento matemático. E ainda assim, em muitos casos, o modelamento fica restrito a condições muito específicas, tais como: somente uma composição química, não inclusão de uma variável significativa tal como a deformação prévia e condição isotérmica de transformação.

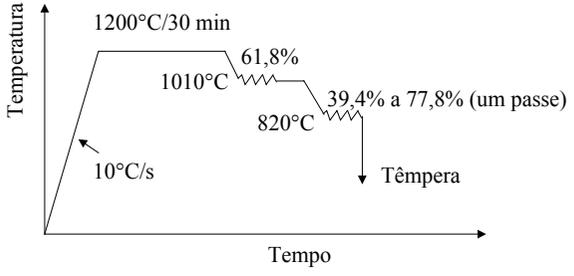
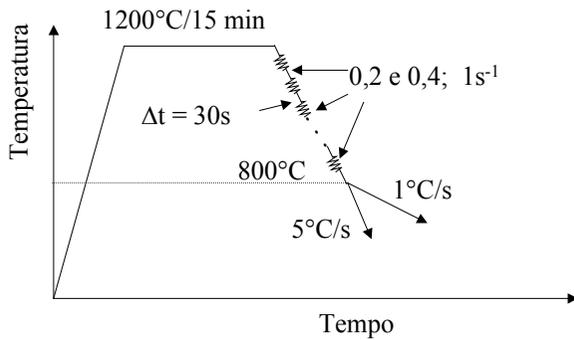
Tabela 3.4 - Principais informações relativas aos estudos de literatura sobre a transformação da austenita e seu modelamento.

Pesquisador (ano)	Aço(s)	Tipo de corpo-de-prova - Equipamento	Procedimento experimental	Comentários
Ye et al. ¹⁷³ (2004)	0,38C-Cr-Mo	8 mm diâmetro por 16 mm comprimento - Gleeble 3500	<p>1200°C/5 min $\sigma = 0 \sim 60$ MPa - Compressão 645 ~ 715°C (transformação isotérmica) 20°C/s Temperatura Tempo</p>	<ul style="list-style-type: none"> Foi estudado o efeito da tensão aplicada na cinética de transformação. A cinética de transformação isotérmica foi modelada por equações do tipo Avrami, sendo b e n formulados em função da tensão aplicada.
Venktraman et al. ³⁹ (2001)	HSLA 100 0,05C-Mn-Si-Ni-Cr-Cu-Mo, recebido como chapa temperada e revenida	10 mm diâmetro por 15 mm comprimento - Gleeble 1500	<p>900°C/3 min Compressão $0,05 \sim 300$°C/s Temperatura Tempo</p>	<ul style="list-style-type: none"> Microestrutura obtida foi ferrita acicular. Usada regra da alavanca para cálculo da fração transformada. Foi modelada a cinética de transformação em resfriamento contínuo por uma equação modificada de Avrami: $X = 1 - \exp[-(t/\tau)^n]$, onde τ é um parâmetro em função da temperatura. Os valores de n variaram com a temperatura, indicando que o ajuste do modelo foi específico para a condição experimental, não sendo válido no geral.

<p>Thomson et al.³⁷ (1996)</p>	<p>HSLA 80 0,05C-Mn-Si-Cu-Cr-Ni-Mo-Nb - Amostra de chapa grossa comercial de 32 mm, laminada e resfriada ao ar.</p>	<p>6,44 mm diâmetro por 101,6 mm comprimento, corpos-de-prova tubulares para altas taxas de resfriamento - Gleeble 1500</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Análise detalhada das microestruturas formadas, constituídas basicamente por ferrita. • Estudo da taxa de resfriamento na microestrutura formada. • Construído diagrama CCT. • Não foi estudada nem modelada a cinética de transformação.
<p>Cizek et al.³⁸ (2002)</p>	<p>C (0,005 ~0,05)-Mn-Si-Nb-Ti, com eventuais adições de Mo e B - Amostras de chapas de 6 mm de espessura laminadas a quente piloto, a partir de lingote fabricado em forno piloto</p>	<p>4 mm diâmetro por 8 mm comprimento - Dilatômetro de deformação BHPR - ML</p>		<ul style="list-style-type: none"> • As deformações foram por compressão e as duas figuras representam a transformação da austenita recristalizada e da austenita deformada. • Análise detalhada das microestruturas formadas, constituídas basicamente por ferrita. • Estudo do efeito da composição química (C, B e Mo), da condição da austenita (deformada ou recristalizada) e da taxa de resfriamento na microestrutura formada. • Não foi estudada nem modelada a cinética de transformação

<p>Venktra-man et al.¹⁷⁴ (2001)</p>	<p>HSLA 100 0,05C-Mn-Si-Ni-Cr-Cu-Mo, recebido como chapa temperada e revenida</p>	<p>10 mm diâmetro por 15 mm comprimento - Gleeble 1500</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Análise das microestruturas formadas, constituídas basicamente por ferrita. • Estudo da taxa de resfriamento na microestrutura formada. • Construído diagrama CCT. • Avaliada a influência dos mecanismos endurecedores na ferrita. • Não foi estudada nem modelada a cinética de transformação.
<p>Yamamoto et al.⁴⁰ (1995)</p>	<p>(0,04 e 0,17)C-Mn-Si-Ti- (Nb ou B) - Amostra de chapa grossa laminada a quente</p>	<p>8 mm diâmetro por 12 mm comprimento - Dilatômetro a laser</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Análise detalhada da microestrutura, formada por ferrita bainítica. • Em alguns ensaios não houve aplicação de deformação, sendo estudada a transformação a partir de um grão austenítico grosseiro. • Construídos diagramas CCT. • Discutidos os mecanismos de formação da ferrita bainítica.

<p>Liu et al.¹²⁷ (1995)</p>	<p>Aços C-Mn-Si-Nb - Amostras de chapas grossas industriais</p>	<p>5 mm diâmetro por 8 mm comprimento - Máquina de torção</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Apresentado o método de análise da transformação baseado na evolução da tensão com a temperatura. • Análise sucinta, destacando apenas o método experimental, onde uma seqüência de passes de torção é aplicada, seguida de resfriamento contínuo.
<p>Khlestov et al.¹¹⁰ (2001)</p>	<p>Aços C-Mn-Si-Ti e combinações de Nb, Cr, V e Mo</p>	<p>Chapas de espessura entre 10 mm e 12 mm - Laminação piloto</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Análise da microestrutura formada. • Discussão sobre a relevância da nucleação no interior do grão deformado.
<p>Gupta²⁶ (2001)</p>	<p>Aços C-Mn-Si-Nb - Amostra de chapa laminada</p>	<p>Chapas de 2 mm de espessura, e 6 x 6 mm²</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Têmpera em várias temperaturas de transformação. • Análise da cinética de transformação isotérmica através de observações metalográficas e medições da espessura da camada transformada.

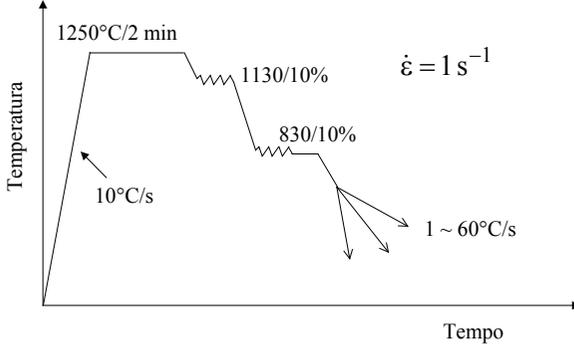
<p>Kvackaj e Mamuzic¹⁰⁵ (1998)</p>	<p>Aço C-Mn-Si-Nb-V - Não cita origem do material</p>	<p>Espessura inicial de 25 mm - Não é citado o equipamento</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Dedução de expressões para cálculo do tamanho de grão ferrítico em função das condições de deformação e do tamanho de grão austenítico.
<p>Bengochea et al.¹¹¹ (1999)</p>	<p>Aço C-Mn-Si-Nb-V - Não cita origem do material</p>	<p>7,5 mm diâmetro por 17 mm comprimento - Máquina de torção</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Análise da influência das condições de processamento no tamanho de grão ferrítico e na fração de ferrita. • Desenvolvimento de equações para prever o tamanho de grão ferrítico.

<p>Manohar e Chandra¹⁰⁸ (1996)</p>	<p>Aço C-Mn-Si-Nb-Ti-Mo - Não cita origem do material</p>	<p>corpos-de-prova ocos de 10 mm comprimento e parede de 0,75 mm; corpos-de-prova maciços 3,2 mm diâmetro por 6 mm, para ensaios com deformação - Dilatômetro</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Construídos diagramas CCT. • Analisada a influência das condições de processamento na temperatura de início de transformação e na microestrutura.
<p>Priestner e Hodgson¹²³ (1992)</p>	<p>Aço C-Mn-Si-Nb - Não cita origem do material</p>	<p>6,3 mm diâmetro por 20 mm comprimento, para ensaios com deformação por torção - Não cita o equipamento</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Foi estudada a cinética de nucleação da ferrita e o tamanho de grão final, por metalografia.

<p>Majta et al.¹¹⁹ (2002)</p>	<p>Aço C-Mn-Si-Nb - Não cita origem do material</p>	<p>Não cita dimensões do corpo-de-prova. A deformação foi por compressão - Gleeble 1500</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Avaliação das curvas tensão-deformação do material. • Desenvolvimento de modelo matemático para transformação de fase. • Avaliação do efeito da deformação na região bifásica na transformação.
<p>Nakata e Militzer^{112,113} (2000)</p>	<p>Aço HSLA 80 C-Mn-Nb-Ti</p>	<p>corpos-de-prova tubulares de 20 mm comprimento por 8 mm diâmetro externo e 1 mm de parede; corpos-de-prova maciços de 10 mm comprimento por 6 mm diâmetro para ensaios com compressão - Gleeble e Simulador por torção</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Modelamento da cinética de transformação e do tamanho de grão austenítico em função das variáveis de ensaio. • Utilização de equações do tipo Avrami acopladas com a regra da aditividade. • Os parâmetros b e n foram agrupados por faixas das variáveis dos ensaios.

<p>Pereloma e Boyd¹¹⁴ (1996)</p>	<p>Aço C-Mn-Nb-Ti</p>	<p>4 mm diâmetro por 8 mm comprimento, sendo o comprimento transversal à direção de laminação - Amostra de esboço de tiras a quente Dilatômetro de deformação MMC.</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Caracterização detalhada da microestrutura formada após interrupção do resfriamento acelerado em diferentes temperaturas, incluindo as fases e os precipitados. • Determinação das temperaturas de transformação. • Comparação da microestrutura obtida em laboratório com a obtida industrialmente, mostrando que são diferentes, sendo a última mais fina e os precipitados formados também diferentes.
<p>Bühler et al.¹²⁰ (2003)</p>	<p>Aço C-Mn-Nb mais adições de Ti ou V</p>	<p>corpos-de-prova de 6 mm diâmetro por 8 mm de comprimento - Amostras retiradas do centro de chapas grossas - Gleeble 3500</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Estudo do efeito das variáveis tamanho de grão inicial e taxa de resfriamento na temperatura de início de transformação e no tamanho de grão ferrítico.

<p>J. Wu et al.¹⁰¹ (2003)</p>	<p>Aço C-Mn-Nb mais adições de Ti ou V</p>	<p>corpos-de-prova de 3 mm diâmetro por 10 mm comprimento para o Dilatômetro Theta Dilatronic II; corpos-de-prova de 10 mm diâmetro por 13 mm comprimento para MTS - Amostras de placas comerciais</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Caracterização da microestrutura formada incluindo precipitados. • Determinação da temperatura de início de transformação. • Construção de diagramas CCT. • Determinação da evolução da fração transformada com a temperatura (regra da alavanca). • Estudo da nucleação da ferrita intragranular e no contorno de grão.
<p>Qu et al.¹⁷⁵ (2002)</p>	<p>Aço C-Mn-Nb-V-Ti</p>	<p>corpos-de-prova de compressão de 8 mm diâmetro por 20 mm de comprimento - Amostras retiradas de chapas laminadas em escala piloto - Gleeble 1500</p>		<ul style="list-style-type: none"> • Além do esquema ao lado, foram também utilizados outros esquemas de ensaios mais simples. • Estudo do efeito das condições de deformação (temperatura, quantidade de passes e deformação por passe) na microestrutura final. • Os seus resultados mostraram que o efeito de um único passe, acima ou abaixo da temperatura de não recristalização, é menor que o de dois passes com mesma deformação total.

<p>Leysen et al.¹⁷⁶ (2003)</p>	<p>Aços CMn e CMnNb</p>	<p>corpos-de-prova de 3,5 mm de diâmetro e 5 mm de comprimento - Dilatômetro de deformação Theta III S</p>	 <p>1250°C/2 min 10°C/s 1130/10% 830/10% $\dot{\epsilon} = 1 \text{ s}^{-1}$ 1 ~ 60°C/s Temperatura Tempo</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Investigou o efeito do Nb, em relação ao aço base CMn, com relação à transformação da austenita da mesa de resfriamento de tiras a quente. • Analisa também a influência da deformação aplicada, que favorece a formação de ferrita e perlita, em detrimento dos produtos de baixa temperatura de transformação.
---	-------------------------	--	--	---

3.11 Resumo

No Capítulo 3 foi realizada uma síntese dos conceitos envolvendo a transformação de fase, com ênfase na decomposição da austenita em aços CMn e microligados, em condições isotérmicas e em resfriamento contínuo. Foram também mostrados os principais resultados de pesquisas divulgadas sobre o assunto nas últimas décadas. Foram destacados os fatores que influenciam na cinética de decomposição da austenita, que são: (i) condição prévia da austenita, em termos de tamanho de grão recristalizado, de grau de encruamento, natureza e distribuição de precipitados, elementos em solução sólida e composição química; (ii) taxa de resfriamento. Foram apresentadas as formulações matemáticas principais que têm sido aplicadas para o modelamento da transformação da austenita, com ênfase em condições de resfriamento contínuo. Tais formulações devem prever a temperatura de início de transformação e a cinética do processo, resultando na determinação das fases/constituintes formados, juntamente com suas características microestruturais. Existem formulações diversas na literatura, geralmente aplicadas especificamente a uma condição de ensaio e/ou determinado pesquisador. Com isso, há um grande espaço ainda para avanços nesta área, especialmente quando é buscada uma formulação matemática que possa prever a cinética de transformação em condições que se aproximem do processo industrial de laminação em tiras a quente. O modelamento da transformação é mais complicado para os aços microligados, devido a efeitos de encruamento da austenita antes da transformação, da composição química, que favorece a formação de constituintes de baixa temperatura, e da precipitação antes e durante a transformação. Foi ainda mostrada na revisão uma série de esquemas de ensaios experimentais utilizados no estudo da transformação da austenita.

4. CÁLCULOS TERMODINÂMICOS

No presente trabalho foi necessário desenvolver cálculos termodinâmicos das linhas de equilíbrio, representadas no diagrama Fe-C, para o aço estudado a fim de se modelar a cinética de transformação e a fração de perlita formada. Os cálculos básicos foram realizados através das formulações e base de dados fornecidos por Kirkaldy e colaboradores^{48,52}, complementados pelos valores de variação de energia livre do Fe, na transformação da austenita para a ferrita, dados por Harvig¹⁷⁷. Os cálculos são válidos para aços contendo, além do C, os elementos Mn, Si, Ni, Cr, Cu e Mo.

4.1. Cálculo da Temperatura Ae₃

A igualdade dos potenciais químicos dos elementos na austenita e na ferrita é dada pelas equações (4.1) e (4.2). O índice 0 refere-se ao Fe, e os índices de 1 a 7 referem-se ao C, Mn, Si, Ni, Cr, Mo e Cu, nesta ordem. $\Delta^0 G_i^{\alpha-\gamma} = {}^0 G_i^\gamma - {}^0 G_i^\alpha$ é a variação de energia livre de Gibbs quando o soluto passa da austenita para a ferrita, X é a fração molar do elemento e ε é o parâmetro de interação de Wagner.

Para o ferro:

$$\frac{\Delta^0 G_0^{\alpha-\gamma}}{RT} - \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^7 \varepsilon_{ik}^\gamma X_i^\gamma X_k^\gamma + \ln X_0^\gamma = \ln X_0^\alpha - \frac{1}{2} \sum_{i,k=1}^7 \varepsilon_{ik}^\alpha X_i^\alpha X_k^\alpha \quad (4.1)$$

Para os demais elementos (i=1,7):

$$\frac{\Delta^0 G_i^{\alpha-\gamma}}{RT} + \sum_{k=1}^7 \varepsilon_{ik}^\gamma X_k^\gamma + \ln X_i^\gamma = \ln X_i^\alpha + \sum_{k=1}^7 \varepsilon_{ik}^\alpha X_k^\alpha \quad (4.2)$$

As equações (4.1) e (4.2) representam um sistema de 8 equações e 8 incógnitas, sendo elas a temperatura e as frações molares dos elementos de 1 a 7 na ferrita. A metodologia

de resolução deste sistema de equações envolve: (i) partindo-se de um valor arbitrário de temperatura, resolve-se o sistema não linear de sete equações e sete incógnitas dado em (4.2); (ii) os valores de fração molar na ferrita encontrados são usados para resolução da equação não linear (4.1) de forma iterativa, encontrando-se uma nova temperatura; (iii) aplica-se o novo valor de temperatura para uma nova solução do sistema de equações não lineares em (4.2); (iv) repete-se este procedimento até que haja convergência tanto da temperatura quanto das frações molares calculadas.

Após convergência, a temperatura obtida é a de equilíbrio Ae_3 . A fração molar do ferro é calculada de forma a totalizar na unidade as frações molares de todos os elementos. Essas frações molares obtidas na ferrita possibilitam localizar o ponto na linha de equilíbrio austenita/ferrita.

Para fins computacionais, as equações (4.1) e (4.2) são escritas como em (4.3) e (4.4).

$$\Psi_0(T, \varepsilon_{ik}^\gamma, X_i^\gamma) - \eta_0(\varepsilon_{ik}^\alpha, X_i^\alpha) = \phi(T, \varepsilon_{ik}^\gamma, X_i^\gamma, \varepsilon_{ik}^\alpha, X_i^\alpha) \rightarrow 0 \quad (4.3)$$

$$\Psi_i(T, \varepsilon_{ik}^\gamma, X_i^\gamma) = \eta_i(\varepsilon_{ik}^\alpha, X_i^\alpha) \quad (4.4)$$

As variações de energia livre padrão dos elementos de 1 a 7 na transformação austenita ferrita, em função da temperatura, são dadas no trabalho de Kirkaldy e Thomson⁵². Para o Fe, foram usados os dados Tabelados por Harvig¹⁷⁷, ajustando-se um polinômio de terceiro grau em função da temperatura.

Os valores dos parâmetros de interação de Wagner foram também obtidos no trabalho citado, assumindo-se que as interações ε_{ii} em γ e α são constantes e iguais aos valores obtidos para a temperatura de 1100K. As interações entre átomos substitucionais de soluto foram desprezadas e as interações ε_{ik} são dadas em função da temperatura.

A transformação da concentração em porcentagem em massa para fração molar é obtida pela expressão (4.5), sendo para isso, suposta uma massa total de 100 g da liga. Isso permite que a massa de cada elemento, m_i , seja igual a sua porcentagem em

peso. Nesta equação, C_i é a porcentagem em massa do elemento i ; m_i é a massa do elemento i ; e PM_i é o peso molecular do elemento i .

$$m_i = C_i$$

$$X_i = \frac{m_i / PM_i}{m_{Fe} / PM_{Fe} + \sum_{i=1,7} m_i / PM_i} \quad (4.5)$$

Numa dada temperatura, o primeiro membro da equação (4.2) é constante, de forma que ela pode ser escrita de acordo com a seqüência de equações de (4.6) a (4.12).

$$i = 1 \text{ C} \quad \ln X_C^\alpha + \varepsilon_{CC}^\alpha X_C^\alpha + \varepsilon_{CMn}^\alpha X_{Mn}^\alpha + \varepsilon_{CSi}^\alpha X_{Si}^\alpha + \varepsilon_{CCr}^\alpha X_{Cr}^\alpha + \varepsilon_{CNi}^\alpha X_{Ni}^\alpha + \varepsilon_{CMo}^\alpha X_{Mo}^\alpha + \varepsilon_{CCu}^\alpha X_{Cu}^\alpha = y_1 \quad (4.6)$$

$$i = 2 \text{ Mn} \quad \ln X_{Mn}^\alpha + \varepsilon_{MnMn}^\alpha X_{Mn}^\alpha + \varepsilon_{CMn}^\alpha X_C^\alpha = y_2 \quad (4.7)$$

$$i = 3 \text{ Si} \quad \ln X_{Si}^\alpha + \varepsilon_{SiSi}^\alpha X_{Si}^\alpha + \varepsilon_{CSi}^\alpha X_C^\alpha = y_3 \quad (4.8)$$

$$i = 4 \text{ Ni} \quad \ln X_{Ni}^\alpha + \varepsilon_{NiNi}^\alpha X_{Ni}^\alpha + \varepsilon_{CNi}^\alpha X_C^\alpha = y_4 \quad (4.9)$$

$$i = 5 \text{ Cr} \quad \ln X_{Cr}^\alpha + \varepsilon_{CrCr}^\alpha X_{Cr}^\alpha + \varepsilon_{CCr}^\alpha X_C^\alpha = y_5 \quad (4.10)$$

$$i = 6 \text{ Mo} \quad \ln X_{Mo}^\alpha + \varepsilon_{MoMo}^\alpha X_{Mo}^\alpha + \varepsilon_{CMo}^\alpha X_C^\alpha = y_6 \quad (4.11)$$

$$i = 7 \text{ Cu} \quad \ln X_{Cu}^\alpha + \varepsilon_{CuCu}^\alpha X_{Cu}^\alpha + \varepsilon_{CCu}^\alpha X_C^\alpha = y_7 \quad (4.12)$$

As equações de (4.6) a (4.12) representam um sistema não linear de equações, onde y_i são valores constantes para cada temperatura. Este sistema foi resolvido pelo método de Newton-Raphson¹⁷⁸, descrito nas formulações seguintes.

O sistema é escrito na forma da equação (4.13).

$$\begin{aligned}
 f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\
 f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0 \\
 &\cdot \\
 &\cdot \\
 f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0
 \end{aligned}
 \tag{4.13}$$

O vetor variáveis é:

$$[x] = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T \tag{4.14}$$

Sendo a solução:

$$[\alpha] = [\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n]^T \tag{4.15}$$

A solução do sistema envolve a obtenção das derivadas parciais, da matriz coeficiente e do vetor com os termos independentes, respectivamente pelas equações (4.16), (4.17) e (4.18).

$$f_{ij} = \frac{\partial f_i([x])}{\partial x_j} \tag{4.16}$$

$$\varphi([x]) = [f_{ij}([x])] \tag{4.17}$$

$$f([x]) = [f_1([x]), f_2([x]), \dots, f_n([x])]^T \tag{4.18}$$

A solução avança pela solução do sistema linear em (4.19).

$$\varphi([x_k])[\delta_k] = -f([x_k]) \tag{4.19}$$

Os incrementos de $([x])$ são somados à solução anterior pela equação (4.20), até que a solução dada pela equação (4.15), seja atingida, quando as variações incrementais são

menores que a tolerância admitida. A solução inicial é um valor arbitrário, sendo um dado de entrada no programa.

$$[x_{k+1}] = [x_k] + [\delta_k] \quad (4.20)$$

A determinação da temperatura Ae_3 é feita da seguinte maneira. Assumindo-se uma temperatura arbitrária, T_0 , determinam-se as constantes y_1, \dots, y_n , e resolve-se o sistema não linear gerado para as frações molares na ferrita, equações de (4.6) a (4.12). Os valores obtidos de x_i^α são, então, substituídos na equação (4.3), que fica sendo apenas função da temperatura. Esta equação é resolvida por Newton-Raphson¹⁷⁸. Para isso, toma-se um pequeno acréscimo, H , em T_0 , encontram-se os valores de x_i^α , e calcula-se a nova temperatura pela equação (4.21).

$$T_{\text{nova}} = T_0 - \phi / \phi' \quad (4.21)$$

ϕ' é a derivada de ϕ . Os valores de ϕ' e ϕ são obtidos pelas equações:

$$\begin{aligned} \phi' &= (\phi_2 - \phi_1) / H \\ \phi &= (\phi_2 + \phi_1) / 2 \end{aligned} \quad (4.22)$$

O processo é repetido iterativamente e, a cada novo cálculo de T_{nova} , T_0 é substituído por este valor. Quando a solução em T converge, o sistema não linear é novamente resolvido e volta-se à equação (4.3), conforme procedimento acima. A solução final de temperatura, Ae_3 , e as concentrações de equilíbrio na ferrita são obtidas quando a variação ($T_{\text{nova}} - T_0$) torna-se menor que a tolerância estabelecida.

Normalmente, a solução é atingida com cerca de 5 iterações. Os valores dos parâmetros usados foram: $H = 5^\circ\text{C}$, tolerância de temperatura = $0,1^\circ\text{C}$ e tolerância para solução das frações molares = $1\text{E-}05$. Para teores de carbono próximos de zero ou acima de 1,0% não houve convergência da solução.

Os valores de Ae_3 calculados pela rotina desenvolvida neste trabalho foram comparados com os valores fornecidos na literatura para alguns aços, Tabela 4.1. Nota-se que a diferença não é significativa, considerando-se o desenvolvimento do modelo objetivado.

Tabela 4.1 - Comparação entre valores de Ae_3 calculados com a rotina desenvolvida neste trabalho e os obtidos conforme se relata na literatura.

Composição química do aço (% em massa)						Ae_3 (°C)	
C	Mn	Si	Nb	V	Ti	Militzer ¹³	Rotina
0,04	0,30	0,009	-	-	-	883	876
0,045	0,45	0,069	-	0,08	0,002	876	869
0,08	0,48	0,045	0,036	-	-	860	855
0,07	0,76	0,014	0,023	-	0,013	857	851
0,07	1,35	0,14	0,086	-	0,047	843	838

4.2. Cálculo das Linhas de Equilíbrio $\alpha/\alpha+\gamma$ e $\alpha+\gamma/\gamma$

As linhas de equilíbrio $\alpha/\alpha+\gamma$ e $\alpha+\gamma/\gamma$ foram calculadas usando-se o procedimento para cálculo de Ae_3 . Para isso, tomou-se um valor inicial de carbono muito baixo (cerca de 0,02%), denominado C_i^j , mantendo-se a concentração dos demais elementos Mn, Si, ... nos mesmos valores originais do aço. Calculou-se, então, a temperatura Ae_3 e as concentrações de equilíbrio na ferrita. Adicionou-se um incremento de massa de carbono, equações (4.23) a (4.28), mantendo-se a concentração dos elementos substitucionais e reduzindo-se, para isso, a massa de Fe, de forma que a nova concentração de carbono fosse C_i^{j+1} . Calcularam-se a nova temperatura e as novas concentrações de equilíbrio na ferrita. Seguindo-se este procedimento, foram traçadas as linhas de equilíbrio que delimitam o campo da austenita.

Num instante j qualquer do cálculo, vale a equação (4.23), onde m_i é a massa do elemento i .

$$C_i^j = \frac{m_i}{m_t} * 100 \quad (4.23)$$

Admitindo-se que a massa total seja $m_t = 100$, tem-se a equação (4.24).

$$C_i^j = m_i^j \quad (4.24)$$

Num instante de cálculo posterior, $j+1$, vale a relação (4.25), onde m_c^a é a massa de carbono adicionado.

$$m_{total}^{j+1} = m_i^j + m_c^a \quad (4.25)$$

Combinando-se as equações (4.23) e (4.25), obtém-se a (4.26).

$$m_c^a = \frac{C_C^{j+1} - C_C^j}{1 - C_C^{j+1}/100} \quad (4.26)$$

Daí, obtém-se a equação (4.27).

$$m_t^{j+1} = 100 + m_c^a \quad (4.27)$$

Para os demais elementos, vale a relação geral (4.28).

$$C_i^{j+1} = \frac{C_i^j}{m_t} 100 \quad (4.28)$$

4.3. Cálculo da Linha de Equilíbrio γ /cementita, Linha A_{cm}

Foram utilizadas duas bases de dados para cálculo de A_{cm} , uma de Kirkaldy et al.^{48,52}, que representa o equilíbrio com partição de todos os elementos entre as duas fases, austenita e cementita, e a outra, de Miettinen⁶⁵, que representa a condição de partição apenas do C, ou seja, para equilíbrio.

4.3.1 Base de dados de Kirkaldy

O cálculo da linha A_{cm} desenvolvido por Kirkaldy⁴⁸ partiu da linha de equilíbrio no diagrama Fe-C, dada por (4.29), onde T é em °C.

$$T = 11,661\%C^3 - 120,81\%C^2 + 580,37\%C + 349,09 \quad (4.29)$$

Para pequenas adições de elementos de liga, a nova linha de equilíbrio pode ser obtida considerando-se as variações de potenciais químicos pela equação de Gibbs-Duhem. Kirkaldy⁴⁸ deduziu a equação (4.30), que permite o cálculo do teor de carbono na linha A_{cm} , em fração molar X_I , para um aço contendo adições de Mn, Si, Cr, Ni. Nesta equação, X_I^{II} é a fração molar de carbono na cementita, isto é, igual a = 0,25; X_i a fração molar dos elementos Mn, Si, Cr e Ni na austenita; ε_{11} e ε_{i1} são parâmetros de interação carbono-carbono e carbono-substitucional, respectivamente, de Wagner; k_i representa os coeficientes de partição entre austenita e cementita, dados em função da temperatura.

$$X_I - X_I^C = - \frac{X_I^C \sum_{i=2}^n X_i [k_i - 1 + (1 + \varepsilon_{i1})(X_I^{II} - X_I^C)]}{X_I^{II} + X_I^C [(X_I^{II} - X_I^C)(1 + \varepsilon_{11}) - 1]} \quad (4.30)$$

Como X_I^C refere-se ao equilíbrio austenita/cementita, na ausência de elementos de liga, é necessário fazer a transformação da porcentagem em massa para fração molar, de acordo com a equação (4.31).

$$X_I^C = \frac{\%C/12}{\%C/12 + (100 - \%C)/55,85} \quad (4.31)$$

4.3.2 Base de dados de Miettinen

A condição de paraequilíbrio entre a cementita, c, e a fase ϕ (α ou γ) é dada por (4.32).

$$X_{\text{Fe}}^0 \left(\mu_{\text{Fe}_3\text{C}}^c - 3\mu_{\text{Fe}}^\phi - \mu_{\text{C}}^\phi \right) + \sum_{M=3}^n X_M^\phi \left(\mu_{\text{M}_3\text{C}}^c - 3\mu_M^\phi - \mu_{\text{C}}^\phi \right) = 0 \quad (4.32)$$

Onde $\mu_{\text{M}_3\text{C}}^c$ é o potencial do carboneto M_3C na cementita.

Dada a não redistribuição do soluto, prevalece a relação (4.33).

$$X_M^\phi / X_{\text{Fe}}^\phi = y_M^c / y_{\text{Fe}}^c = X_M^0 / X_{\text{Fe}}^0 = k_M, \quad M = 3, n \quad (4.33)$$

Onde y_M^c é a fração de sítios na cementita ocupados pelo substitucional M.

Da equação (4.33) é deduzida a (4.34).

$$X_M^\phi = (1 - X_{\text{C}}^\phi) k_M / \left(1 + \sum_{M=3}^n k_M \right) \quad (4.34)$$

A equação (4.34) é equivalente à (4.35), onde PX_j^ϕ e APX são parâmetros deduzidos pela comparação destas equações.

$$X_M^\phi = (1 - X_{\text{C}}^\phi) PX_j^\phi \quad X_{\text{Fe}}^\phi = APX(1 - X_{\text{C}}^\phi) \quad (4.35)$$

Por outro lado, a fração de sítios dos elementos substitucionais e do Fe na cementita é calculado por (4.36).

$$y_M^c = k_M / \left(1 + \sum_{M=3}^n k_M \right) \quad \text{e} \quad y_{\text{Fe}}^c = 1 - \sum_{M=3}^n y_M^c \quad (4.36)$$

O potencial do carboneto de Fe é dado pela expressão (4.37).

$$\mu_{\text{Fe}_3\text{C}}^c = \left(G_{\text{Fe}_3\text{C}}^{0,c} - 3H_{\text{Fe}}^P - H_{\text{C}}^P \right) + 3RT \ln y_{\text{Fe}}^c + (1 - y_{\text{Fe}}^c) \sum_{i=3}^n L_{\text{Fe}i}^c y_i^c \quad (4.37)$$

O primeiro termo entre parênteses do segundo membro representa a variação de energia livre padrão molar para formação do Fe_3C a partir de um estado padrão de referência para o Fe e para o C. Este termo é uma função da temperatura. No último termo, $L_{\text{Fe}i}$ é o coeficiente de interação de átomos de Fe e do soluto substitucional i , na cementita. É, também, uma função da temperatura, conforme base de dados de Miettinen⁶⁵.

O potencial do carboneto M_3C é dado, de forma similar ao Fe, pela equação (4.38).

$$\mu_{\text{M}_3\text{C}}^c = \left(G_{\text{M}_3\text{C}}^{0,c} - 3H_{\text{M}}^P - H_{\text{C}}^P \right) + 3RT \ln y_{\text{M}}^c + y_{\text{Fe}}^c L_{\text{FeM}}^c - \sum_{i=3}^n L_{\text{Fe}i}^c y_i^c \quad (4.38)$$

Analogamente à equação (4.37), os termos dessa expressão são funções da temperatura, que são dadas no trabalho de Miettinen⁶⁵.

A substituição das equações de (4.33) a (4.38) na equação (4.32), fornece uma equação não linear com duas incógnitas, temperatura, T , e fração molar do C na fase ϕ , X_{C}^{ϕ} .

Atribuindo-se valores de temperatura, na faixa desejada, esta equação foi resolvida pelo método de Newton-Raphson, através de um programa de computador, fornecendo as linhas de paraequilíbrio austenita/cementita e ferrita/cementita.

4.4. Rotinas em Fortran

Em anexo estão listadas as rotinas usadas nos cálculos termodinâmicos. A rotina `Trans_Km.for` foi desenvolvida para os cálculos termodinâmicos baseados em Kirkaldy, mas efetua também cálculos da fração transformada pela regra da alavanca e pelo método de Kop et al¹³⁴. Este último método não foi aplicado neste trabalho, mas referências ao seu uso foi dada na Figura 3.26. A curva dilatométrica faz parte dos dados básicos utilizados como entrada para essa rotina. A rotina `MinL_Equ.for` executa os cálculos de acordo com a metodologia de Miettinen. Ressalta-se que a rotina

Trans_KM.for é também aplicada para a cinética de transformação de aços CMn, para os quais as temperaturas de transformação são maiores.

4.5. Resumo

Neste capítulo foi apresentada a metodologia dos cálculos termodinâmicos realizados neste trabalho, que foram usados nos modelos de transformação da austenita. Com a formulação matemática e a base de dados de Kirkaldy e colaboradores^{48,52} foram calculadas as regiões do diagrama de equilíbrio de fases de interesse para esse trabalho, para os aços estudados. Adicionalmente, foram desenvolvidos também cálculos da linha A_{cm} em condição de paraequilíbrio, de acordo com a base de dados de Miettinen. Para a realização dos cálculos foram desenvolvidas rotinas computacionais em linguagem Fortran.

5. METODOLOGIA EXPERIMENTAL

5.1. Materiais Usados

O material base para esse estudo foi um aço microligado ao Nb-V-Ti, processado na Linha de Tiras a Quente da USIMINAS, na espessura de bobina de 12,80 mm. Este aço foi projetado para atender ao grau X70 da norma API. Foi retirada uma amostra do topo do esboço, de 31,3 mm de espessura, obtido pela redução de uma placa de 243 mm durante laminação de desbaste. Essa amostra foi mergulhada em água imediatamente após o corte, visando preservar a condição microestrutural a quente e possibilitar sua restauração no caso de se realizar um reaquecimento rápido à temperatura que o material se encontrava.

Visando-se investigar a influência do teor de Nb na transformação da austenita, foram fabricados três lingotes no Forno de Fusão sob Vácuo do Centro de Pesquisa e Desenvolvimento da USIMINAS, onde o teor desse elemento foi variado, sendo que todos os demais elementos foram mantidos constantes.

As composições químicas destes aços são dadas na Tabela 5.1. O aço processado industrialmente foi identificado como I-47Nb. O lingote base, fabricado em escala piloto, foi identificado como P-48Nb, sendo sua composição similar à do aço industrial. Nos outros dois lingotes o teor de Nb foi variado em dois níveis, um de 0,027%, no lingote identificado como P-27Nb, e outro de 0,068% no lingote identificado como P-68Nb. O objetivo foi realizar ensaios nas mesmas condições para os três aços produzidos em escala piloto a fim de permitir avaliar o efeito do Nb na transformação da austenita, enquanto que a comparação entre resultados de ensaios com os aços produzidos industrialmente e em escala piloto tem o objetivo de se avaliar se existe efeito do tipo de processamento na transformação.

Para processamento a quente em escala piloto, os lingotes, de 50 kg, foram primeiramente aquecidos seguindo-se aproximadamente a curva de aquecimento obtida no processo industrial e, em seguida, laminados de forma convencional para a espessura

de aproximadamente 20 mm, ou seja, para cerca de $\frac{1}{4}$ da sua espessura original. Essa redução é considerada suficiente para quebrar a estrutura bruta de fusão e a chapa fica com espessura adequada para usinagem de corpos-de-prova para os ensaios dilatométricos. A temperatura de final de laminação foi da ordem de 1050°C, próxima da temperatura do esboço no momento em que foi cortada a amostra e temperada. Imediatamente após a laminação, as chapas obtidas foram mergulhadas em um tanque de água para congelamento da microestrutura.

Tabela 5.1 - Composições químicas dos aços estudados (% em massa).

Aço	Nb	C	Mn	Si	V	Ti	P	S	N	Al _{sol}
I-47Nb	0,047	0,11	1,51	0,19	0,042	0,011	0,015	0,0030	0,0079	0,036
P-48Nb	0,048	0,12	1,50	0,19	0,045	0,012	0,012	0,0024	0,0072	0,031
P-27Nb	0,027	0,12	1,53	0,17	0,045	0,011	0,027	0,0025	0,0067	0,034
P-68Nb	0,068	0,11	1,50	0,16	0,044	0,012	0,014	0,0028	0,0072	0,038

5.2. Preparação dos Corpos-de-Prova para os Ensaios

Os ensaios base neste estudo contemplaram ciclos termomecânicos com deformação por compressão, seguida de resfriamento controlado, durante o qual foi feita a medição da variação dimensional do corpo-de-prova com um dilatômetro. Para isso, foram preparados corpos-de-prova cilíndricos maciços de 20 mm de comprimento por 10 mm de diâmetro, sendo seu comprimento paralelo à direção de laminação. No simulador Gleeble 3500, onde foram realizados os ensaios, as dimensões usuais de corpos-de-prova de compressão são 10 mm de diâmetro por 12 a 15 mm de comprimento. Com isso, a relação comprimento/diâmetro fica dentro de uma faixa considerada adequada para o estudo da resistência à deformação a quente dos metais. Entretanto, com o comprimento limitado a 15 mm, a deformação total que poderia ser imposta ao corpo-de-prova, sem risco de se danificar o dilatômetro, seria aquém daquela objetivada nos ensaios. Considerando-se esse fato e que o objetivo do estudo é o efeito da deformação na transformação, e não uma avaliação da resistência a quente do aço, optou-se pelo corpo-de-prova de 20 mm x 10 mm.

Ensaio complementares foram realizados com corpos-de-prova cilíndricos maciços de 6 mm de diâmetro por 15 mm de comprimento. A vantagem destes corpos-de-prova é a obtenção de maiores taxas de resfriamento após deformação, devido ao seu menor diâmetro. Por outro lado, a execução dos ensaios na Gleeble e os controles de deformação e de temperatura são mais difíceis, por suas dimensões não serem padronizadas para este equipamento.

5.3. Ensaio para Avaliação da Microestrutura após Encharque

Vários ensaios foram realizados com o objetivo de determinar as condições adequadas de encharque, em termos de tempo e temperatura. Esta avaliação foi realizada indiretamente através do tamanho de grão austenítico dos aços. Para isso, foram utilizados os corpos-de-prova de 15 mm por 6 mm. O ciclo térmico consistiu no aquecimento a 5°C/s até a temperaturas entre 1000°C e 1250°C, encharque por tempos entre 4 min e 10 min, seguindo-se têmpera do corpo-de-prova.

Seções longitudinais no diâmetro dos corpos-de-prova ensaiados foram preparadas por procedimentos metalográficos padrão e, então, atacadas por ficção, durante um tempo adequado, com solução de ácido pícrico (ácido pícrico saturado em água e com adição de cloreto férrico) para revelação dos contornos de grão austenítico. O tamanho médio do grão austenítico foi determinado pelo método de contagem de interceptos, baseando-se na norma ASTM E112, varrendo-se a região situada no meio do comprimento dos corpos-de-prova, onde existe uniformidade térmica durante o ensaio.

Após a análise da evolução do tamanho de grão com o tempo e temperatura, optou-se pela condição padrão de encharque para os ensaios subsequentes como sendo temperatura/tempo de 1250°C/4 min. Ressalta-se que a utilização de maiores tempos de encharque tornaria excessivamente longos os ensaios, aumentando ainda a possibilidade de ocorrências de problemas tais como o aborto do ensaio por perda de contato do corpo-de-prova com a matriz.

5.4. Ensaio para Avaliação do Grão Recristalizado após Deformação a 1080°C

Nesta etapa de testes, após encharque na condição padrão, os corpos-de-prova foram resfriados a 10°C/s até 1080°C, onde foram aplicadas deformações verdadeiras de 0,25 ou 0,36. O objetivo dessa deformação foi promover a recristalização estática, obtendo-se uma microestrutura refinada e homogênea. Portanto, após os passes, os corpos-de-prova foram mantidos nesta temperatura por 10 s, tempo considerado suficiente para a recristalização, e então, temperados. A Figura 5.1 mostra o ciclo termomecânico empregado. Na Gleeble, a taxa de deformação programada é perfeitamente obedecida, especialmente em baixas taxas, devido ao preciso controle de deslocamento do pistão (cabecote). Também foi realizado um ensaio sem deformação do corpo-de-prova nesta temperatura, mantendo-se a espera de 10 s, seguida de têmpera. A microestrutura esperada neste caso deve ser basicamente a mesma após o final do encharque.

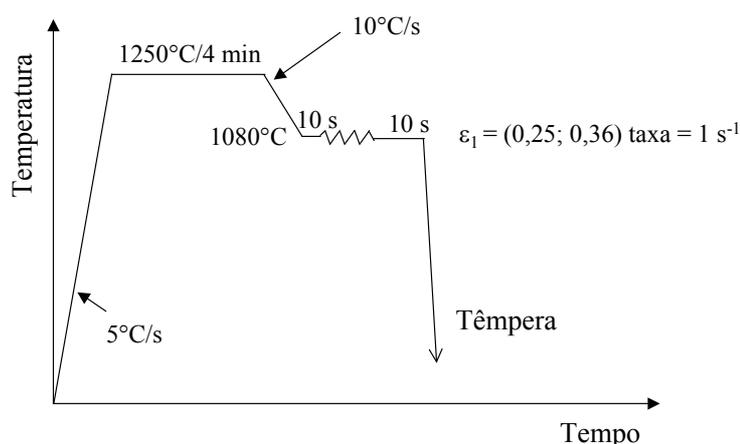


Figura 5.1 - Ensaio para determinação do tamanho de grão recristalizado após deformação.

Da mesma forma citada no item anterior, e em todas as condições de ensaio neste estudo, as análises metalográficas foram conduzidas na seção longitudinal diametral dos corpos-de-prova. O exame da microestrutura restringiu-se à região aproximadamente no meio do comprimento, que corresponde à seção de controle da temperatura pelo termopar soldado sobre o corpo-de-prova, excluindo-se as proximidades de sua superfície. Essa região é a que possui homogeneidade térmica e maior uniformidade de distribuição de deformação. Os procedimentos de observação da seção polida e

determinação do tamanho de grão austenítico, citados no item anterior, foram também utilizados nesta etapa da investigação.

5.5. Ensaios para Avaliação da Microestrutura após Deformação a 880°C

Nestes ensaios, após a deformação de 0,25 a 1080°C e decorrido o tempo de 10 s, os corpos-de-prova foram resfriados a 10°C/s até a temperatura de 880°C, onde foi aplicada uma segunda deformação verdadeira, de 0,22 ou de 0,36. Decorridos 8 s após essas deformações, os corpos-de-prova foram temperados visando preservação da microestrutura até a temperatura ambiente. Também foram realizados ensaios sem aplicação de deformação a 880°C, e, decorridos 8 s nesta temperatura, realizada têmpera. O tempo de 8 s corresponde aproximadamente ao tempo para o percurso da tira entre a última cadeira do laminador de tiras a quente e a entrada no primeiro banco do sistema de resfriamento. A Figura 5.2 mostra o ciclo termomecânico utilizado nesta etapa dos ensaios.

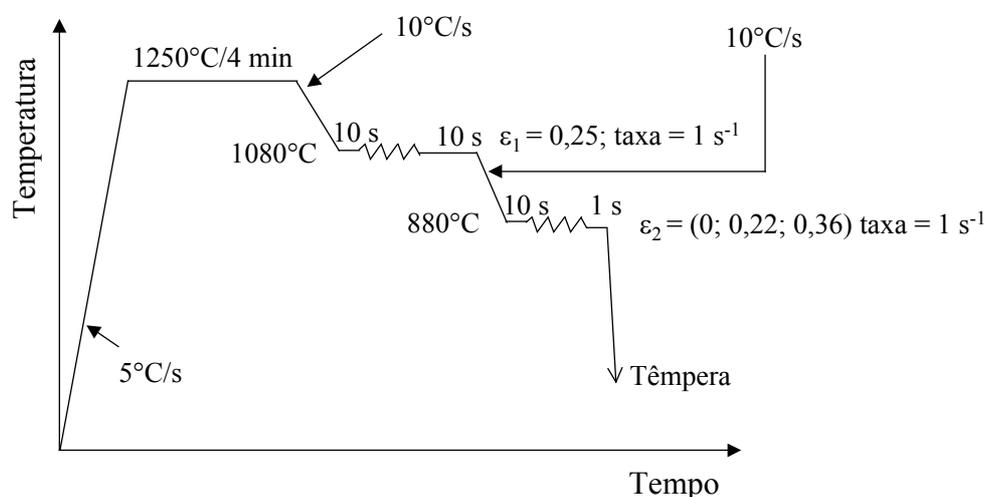


Figura 5.2 - Ensaios para avaliação da estrutura austenítica após deformação a 880°C.

O procedimento metalográfico citado no item anterior foi usado também nesta etapa, exceto que não houve a determinação do tamanho de grão austenítico, uma vez que a microestrutura não estava recristalizada.

5.6. Ensaio para Estudo da Transformação

O esquema dos ensaios dilatométricos básicos realizados é mostrado na Figura 5.3. Nesta etapa foram utilizados normalmente os corpos-de-prova de 20 mm x 10 mm. Para cada aço investigado, as variáveis de ensaio foram: as deformações aplicadas a 1080°C, ε_1 , e a 880°C, ε_2 , a taxa de resfriamento entre 880°C e o início de transformação, TR, e a temperatura de início de resfriamento lento (temperatura de bobinamento), T_b . Ressalta-se que a temperatura de não-recristalização do aço I-47Nb, determinada experimentalmente em ensaios preliminares na Gleeble e usando-se a metodologia de Boratto et. al.¹⁷⁹, foi 958°C. Portanto, após ε_1 espera-se que a austenita recristalize e, após ε_2 , que ocorra encruamento da austenita. Os valores padrão dessas variáveis são mostrados na Tabela 5.2. Após o período Δt com taxa de resfriamento de 0,05°C/s, os corpos-de-prova foram resfriados naturalmente ao ar. Ressalta-se que uma taxa de resfriamento lento de 0,5°C/s foi utilizada nos primeiros ensaios realizados. Em dois ensaios com o aço I-47Nb, a temperatura da segunda deformação foi alterada: uma para 840°C e outra para 920°C. Também houve um ensaio na condição específica de $\varepsilon_1 = 0$ e $\varepsilon_2 = 0,50$.

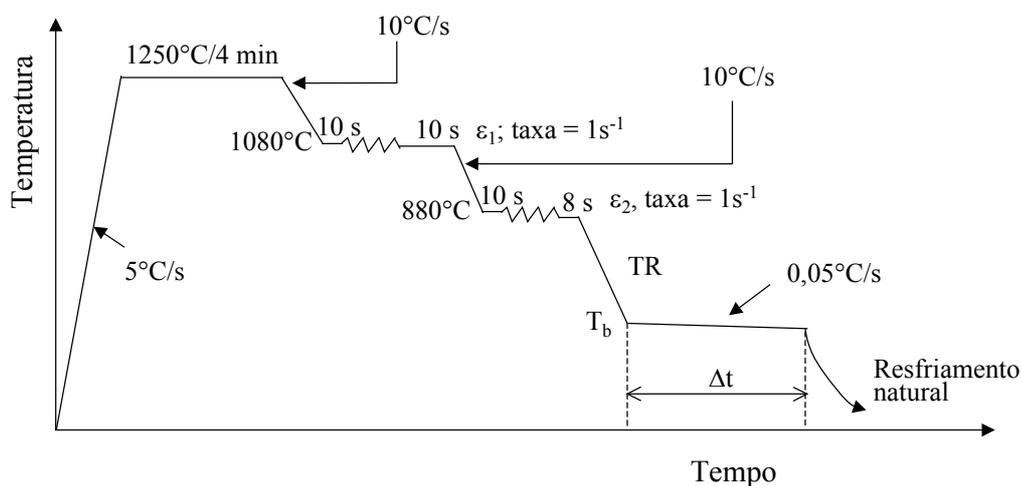


Figura 5.3 - Esquema dos ensaios dilatométricos na Gleeble, na condição com bobinamento.

Tabela 5.2 - Valores das variáveis utilizados nos ensaios dilatométricos com corpos-de-prova de 20 mm por 10 mm.

ϵ_1	ϵ_2	TR (°C/s)	T _b (°C)
0; 0,22; 0,36	0; 0,25; 0,36	0,5; 2; 5 10	550; 575; 600; 625; 650

Os ensaios representados na Figura 5.3 objetivaram o estudo da transformação de fases em condições próximas àquelas existente no processo industrial, onde, após a laminação a quente, a tira passa por um resfriamento rápido por água até uma determinada temperatura de bobinamento. A partir deste instante, a taxa de resfriamento diminui drasticamente. O processo de resfriamento completo da bobina leva de 48 h a 72 h, em taxas iniciais¹⁸⁰ em torno de 0,05°C/s. No presente estudo, o tempo Δt após o bobinamento, na maioria das vezes de 400 s, foi suficiente para completar essa transformação, de forma que não foi necessário prolongar o tempo de ensaio além disso.

Na Figura 5.4 é mostrada uma fotografia do corpo-de-prova na câmara de ensaio durante o encharque.

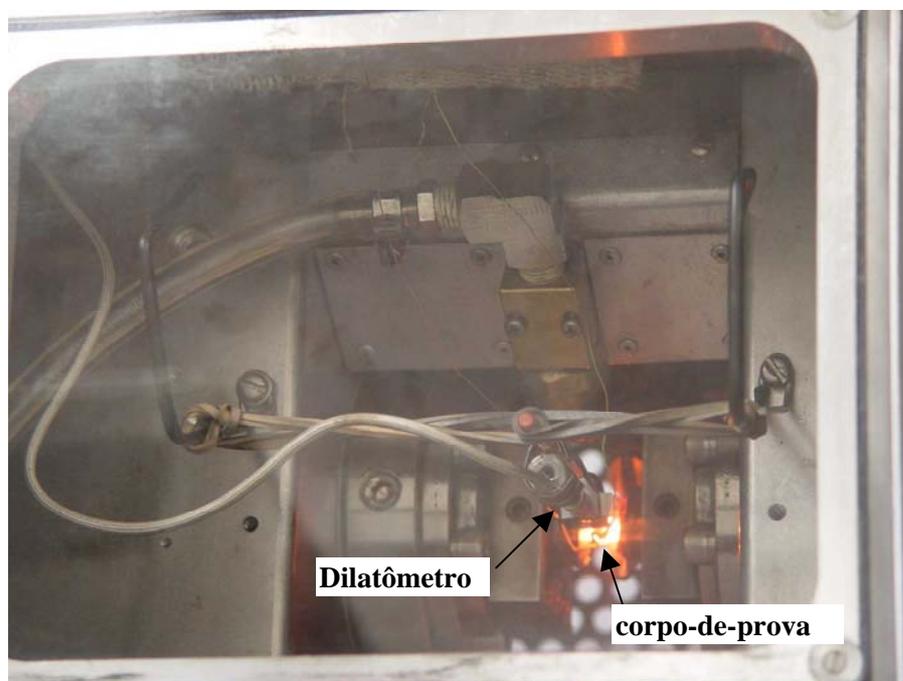


Figura 5.4 - Fotografia mostrando a execução do ensaio durante encharque do corpo-de-prova.

Em outra série de ensaios para estudo da transformação, o resfriamento do corpo-de-prova foi direto até a temperatura ambiente, em taxa constante, portanto, sem considerar o efeito do bobinamento. A Figura 5.5 ilustra este tipo de ensaio.

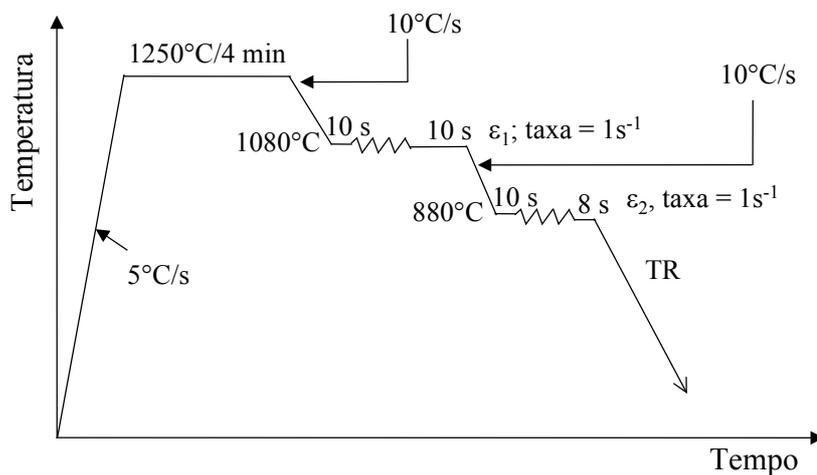


Figura 5.5 - Esquema dos ensaios dilatométricos na Gleeble, na condição sem bobinamento.

Com a utilização dos corpos-de-prova de 10 mm de diâmetro, a taxa máxima de resfriamento obtida após as deformações foi de 10°C/s . Ressalta-se que não é adequada a injeção de líquido refringente diretamente sobre o corpo-de-prova, o que aceleraria o resfriamento, pois isso causa heterogeneidade térmica, distorcendo os resultados das medições dilatométricas. Para se obter taxas mais altas de resfriamento, foram realizados ensaios com os corpos-de-prova maciços de 6 mm de diâmetro, mencionados anteriormente, mas, neste caso, utilizando-se somente o ciclo da Figura 5.5. Com isso, as taxas máximas obtidas foram de até 24°C/s .

Todos os ensaios foram realizados com circulação de gás nitrogênio pela câmara, para evitar oxidação do corpo-de-prova e aumentar a taxa de resfriamento.

O controle de temperatura na máquina Gleeble é feito pela passagem de corrente elétrica pelo corpo-de-prova, sendo que para isso, em ensaios de compressão, é soldado um termopar em sua superfície no meio do comprimento. Quando a máquina está controlando o aquecimento ou resfriamento, a diferença entre valor objetivado e real é abaixo de 2°C . Durante as deformações aplicadas, esta variação é maior, pois o sistema

de controle de temperatura fica momentaneamente desligado. Nas condições dos ensaios realizados, a variação de temperatura durante o passe foi sempre inferior a 10°C.

Todos os dados dos ensaios foram gravados em arquivos para posterior análise. De interesse para o presente estudo, as variáveis armazenadas foram: tempo, temperatura, deformação verdadeira, tensão verdadeira e variação dimensional do corpo-de-prova.

5.7. Ensaios para Caracterização da Microestrutura Durante a Transformação

Alguns ensaios foram realizados com o objetivo de verificar a evolução da transformação por meio de análises metalográficas. Para isso, foi aplicado o ciclo térmico típico mostrado na Figura 5.3, porém interrompendo-se o resfriamento controlado em temperaturas selecionadas, pela aplicação de resfriamento rápido por água. As temperaturas escolhidas foram próximas ao início de transformação e, presumivelmente, no início de formação da perlita. Os valores destas temperaturas são dados nos itens 8.2 e 11.4. Em todos os ensaios com têmpera do corpo-de-prova não houve colocação do dilatômetro, portanto sem aquisição da curva dilatométrica.

Foram feitas seções diametrais ao longo do comprimento dos corpos-de-prova, as quais foram preparadas por procedimentos metalográficos padrão, visando exame por microscopia ótica. O ataque químico foi realizado nestas seções com reagente nital 4%. Nas amostras resfriadas rapidamente logo após o início da transformação, a análise metalográfica consistiu apenas na observação e registro do início da formação da ferrita. Nas amostras resfriadas a partir de instantes intermediários no curso da transformação, foi determinada: (i) a fração volumétrica da ferrita formada, pela técnica de contraste de coloração, utilizando-se um analisador de imagens Zeiss AxioImager.M1m; (ii) tamanho de grão da ferrita, baseando-se na contagem de interceptos e na norma ASTM E112.

5.8. Caracterização dos Corpos-de-prova após Ensaios Dilatométricos

Seções diametrais ao longo do comprimento dos corpos-de-prova ensaiados foram cortadas e polidas por procedimentos metalográficos padrão. Foram realizadas análises

da microestrutura e determinações da dureza, sempre na região do meio do comprimento do corpo-de-prova, por razões já explicadas.

5.8.1 Análise da microestrutura

Em todas as seções preparadas foi realizado um ataque químico com reagente nital 4% para verificação e registro da microestrutura. Após este ataque, foram tomadas 5 fotografias, por corpo-de-prova, de campos varrendo sua espessura e no meio do seu comprimento, com ampliação de 500X. Foi construída uma malha de 12 x 12 pontos e espaçamento entre nós de 6 mm. Esta malha foi aplicada sobre cada uma das fotografias, contando-se os interceptos (nós) que ficaram situados sobre as áreas constituídas de ferrita poligonal. Este procedimento se baseia na norma ASTM E562-02, e foi usado para determinação da fração volumétrica da ferrita poligonal nos corpos-de-prova.

Posteriormente, as seções foram polidas novamente e submetidas ao ataque químico com picral (solução de ácido pícrico a 4% diluído em álcool), por fricção durante um período de cerca de 35 s. Este ataque permite a revelação dos carbonetos e não ataca os contornos de grão. Com isso, na microestrutura constituída de ferrita e perlita apenas a perlita fica destacada, devido à presença da cementita. Os corpos-de-prova, assim preparados, foram então examinados no Analisador de Imagens Zeiss Axiomager.M1m. Através de um adequado ajuste do contraste entre as imagens da perlita, com tonalidade escura, e dos demais constituintes, em tonalidade clara, foi possível distinguir a perlita dos demais constituintes. Foram varridos 32 campos por seção, vistos com ampliação de 500X, e feita a determinação automática da fração da perlita em cada um deles. O valor da fração de perlita considerado na análise foi o resultado da média aritmética global. A fração complementar à da perlita foi considerada como ferrita total, a qual incluiu eventualmente alguma fração de constituinte acicular e/ou MA. Todas os campos de análise foram selecionados na região do meio do comprimento do corpo-de-prova, e varreram praticamente toda a espessura do corpo-de-prova, descartando-se as regiões próximas às superfícies onde a microestrutura foi heterogênea.

Algumas seções metalográficas foram examinadas no Analisador de Imagens com relação á presença do constituinte MA (martensita-austenita). Para isso, após novo polimento fino da superfície, foi feito o ataque com uma mistura contendo em torno de 50% de solução de ácido pícrico a 4% dissolvido em água e 50% de solução de metabissulfito de sódio a 2% dissolvido em água. Neste caso, o ataque foi por imersão e o tempo foi variado conforme as condições da amostra.

Em alguns dos corpos-de-prova ensaiados em condições em que não houve formação significativa de ferrita acicular, tipicamente em ensaios conduzidos a baixas taxas de resfriamento, foi determinado o tamanho de grão ferrítico, baseando-se na contagem de interceptos e na norma ASTM E112.

5.8.2 Análise da dureza

Nas seções metalográficas de alguns ensaios com o aço I-47Nb, foram determinadas a dureza global Vickers (HV 10 kgf) e as microdurezas da ferrita, da perlita e da martensita. Utilizou-se, para isso, um equipamento Futuretec, modelo SM-ARS900. A carga para a microdureza foi de 10 gf. As impressões de dureza foram confinadas à região central do corpo-de-prova, correspondente ao local da análise metalográfica.

5.9. Revenimento de Corpos-de-prova após Ensaios Dilatométricos

Conforme item 5.6, o tempo de resfriamento lento após bobinamento nos ensaios na Gleeble foi de 400 s. No processo industrial, a bobina resfria lentamente por várias horas. Então, foram realizadas experiências de revenimento de alguns corpos-de-prova ensaiados, no intuito de se verificar um eventual efeito do tempo de resfriamento lento na microestrutura e dureza do aço estudado. Essas experiências serviram também como base para a comparação entre as microestruturas dos corpos-de-prova ensaiados em laboratório e a microestrutura da bobina processada industrialmente. Para o revenimento, três corpos-de-prova bobinados a 600°C foram aquecidos a 600°C em um forno de atmosfera controlada, e resfriados, logo após o encharque, com a seguinte condição: taxa de 2,6°C/min (0,043°C/s) entre 600 e 500°C, e taxa de 26°C/h (0,0072°C/s) até 240°C. Portanto, o tempo total de resfriamento lento foi de 10:38 h.

Foram determinadas a dureza e a fração de ferrita total na microestrutura após o revenimento pelos mesmos métodos aplicados nas análises dos corpos-de-prova originais.

5.10. Caracterização da Microestrutura de Amostra da Bobina Industrial

Foi retirada uma amostra de topo (primeira parte a ser laminada) da bobina produzida a partir do esboço que originou a amostra para a confecção dos corpos-de-prova do aço I-47Nb. Foi preparada uma seção metalográfica através da espessura da bobina e paralela à direção de laminação. Nesta seção foram determinadas as frações de ferrita e de perlita, através da análise quantitativa de imagens no Analisador Zeiss AxioImager, após ataque da seção com reagente nital 4%. Também foi determinado o tamanho de grão ferrítico, baseando-se na norma ASTM E122, bem como a dureza Vickers (10 kg) e a microdureza da ferrita e da perlita (10 g), ambas no equipamento descrito no item 5.8.2.

5.10 Resumo

Neste capítulo foram descritas as metodologias utilizadas nos ensaios laboratoriais em equipamento Gleeble para estudar a transformação de fases. Os ensaios básicos compreenderam ciclos de encharque a 1250°C/4 min, seguido de resfriamento e deformações em duas temperaturas, uma acima e outra abaixo da temperatura de não-recristalização, e resfriamento final em duas etapas, uma com alta taxa e outra e baixa taxa. A transformação de fases foi monitorada pelo registro da variação dimensional do corpo-de-prova e pelo acompanhamento da microestrutura quando apropriado. Para análise da microestrutura resultante da transformação, foram conduzidas observações em microscópio ótico e em analisador de imagens, em seções metalográficas na região central dos corpos-de-prova. Adicionalmente, foram realizadas determinações de dureza e microdureza nesta seções.

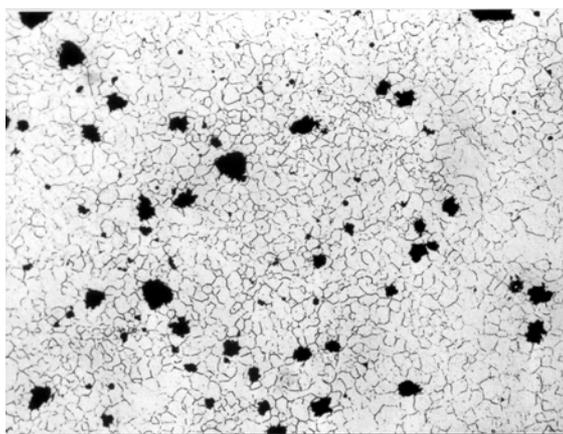
6. EVOLUÇÃO DA MICROESTRUTURA AUSTENÍTICA ANTES DA TRANSFORMAÇÃO

Neste capítulo é mostrada a microestrutura austenítica dos aços estudados em vários instantes do ciclo termomecânico, conforme descrito no Capítulo 5. Isso é relevante uma vez que a transformação da austenita depende de tal microestrutura.

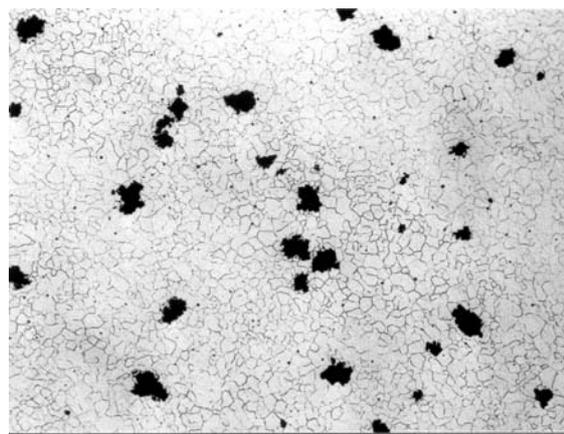
6.1. Grão Austenítico após Encharque

Em todos os corpos-de-prova ensaiados os contornos de grãos austeníticos foram claramente delineados com o ataque de solução de ácido pícrico. Para ilustrar os resultados obtidos, são apresentados neste trabalho somente as microestruturas observadas em parte dos ensaios para os aços I-47Nb e o P-68Nb, sendo que este último possui o teor mais elevado de Nb e, portanto, requer maiores tempos e temperaturas para solubilização.

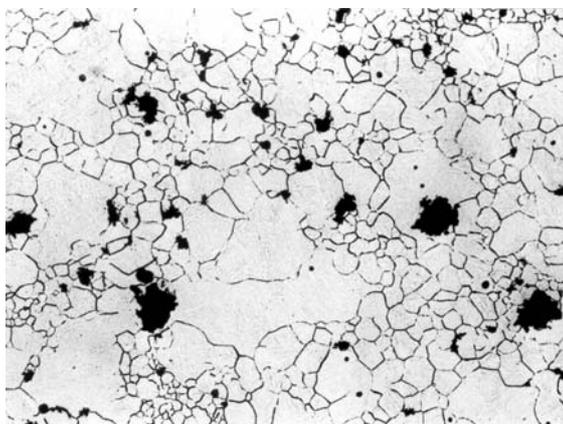
A Figura 6.1 mostra a microestrutura austenítica observada após o encharque em variadas condições temperatura/tempo. Após encharque a 1000°C, o grão austenítico apresenta-se homogêneo, medindo cerca de 10 μm em ambos os aços. Após encharque a 1100°C, por 4 min, observa-se o crescimento de alguns grãos, gerando uma microestrutura muito heterogênea. O encharque à temperatura de 1200°C foi realizado com os tempos de 4 min para o aço I-47Nb, e de 6 min para o aço P-68Nb. Não foi possível a comparação para o mesmo tempo de encharque porque houve problemas na têmpera no ensaio com encharque de 4 min do aço P-68Nb, mas o efeito do tempo de encharque, nessas condições, foi desprezível. No aço I-47Nb, a maioria dos grãos cresceram, mas a microestrutura ainda foi heterogênea. Para o aço P-68Nb, a quantidade de grão crescidos foi menor, o que era esperado, uma vez que o maior teor de Nb implica em maior dificuldade de solubilização dos precipitados, e assim, crescimento dos grãos.



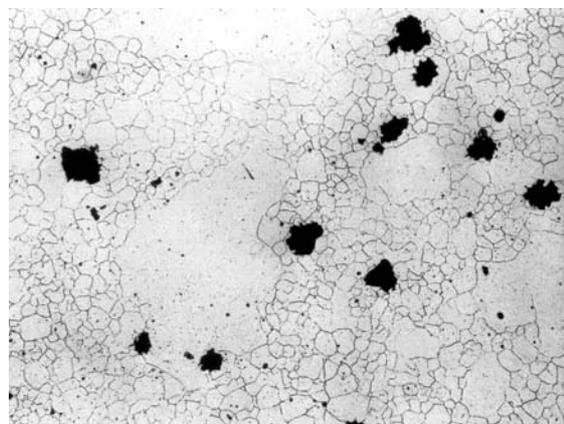
(a) I-47Nb 1000°C/4 min



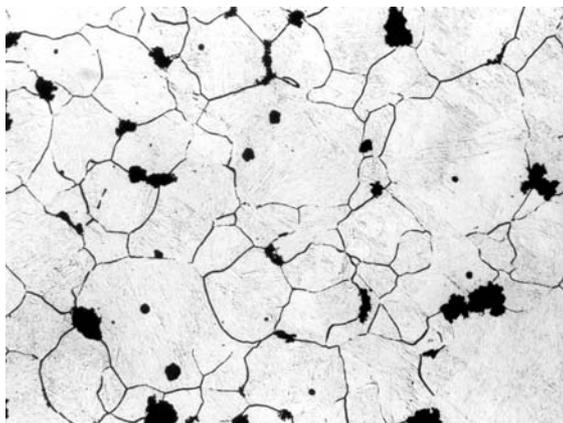
(b) P-68Nb 1000°C/4 min



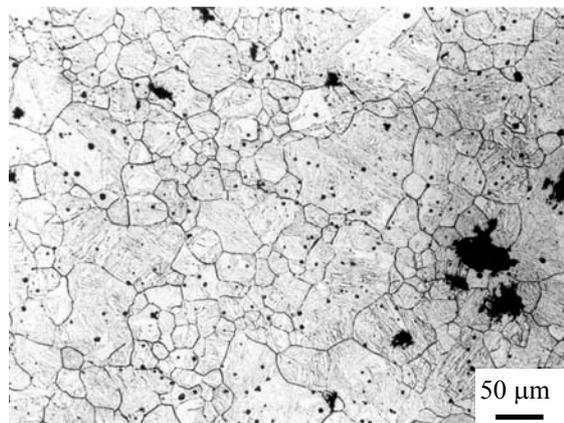
(c) I-47Nb 1100°C/4 min



(d) P-68Nb 1100°C/4 min



(e) I-47Nb 1200°C/4 min



(f) P-68Nb 1200°C/6 min

Figura 6.1 - Estrutura austenítica dos aços após encharque em variadas condições. Mesma ampliação em todas as fotomicrografias.

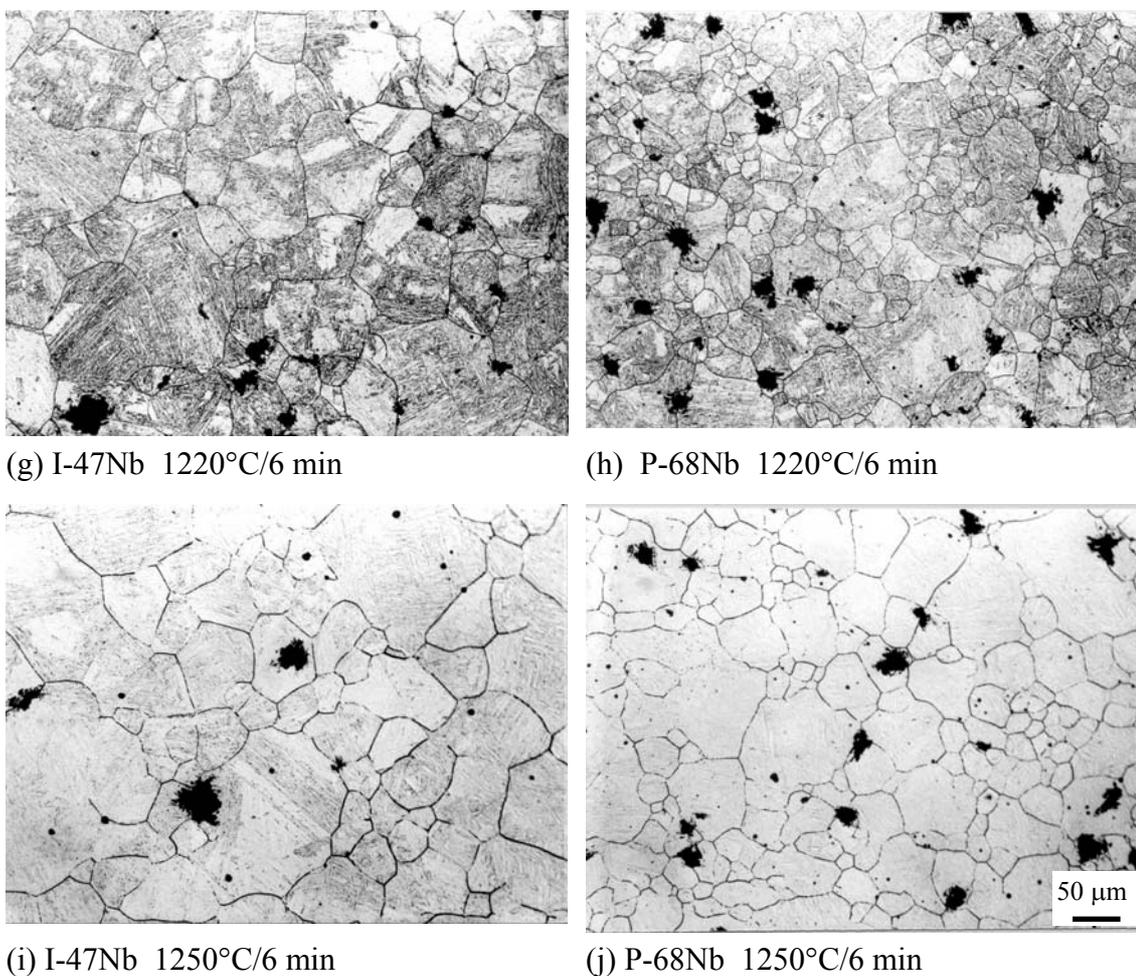


Figura 6.1 - Continuação.

Na temperatura de 1220°C, o encharque foi realizado com 6 min e 10 min, sendo que nas Figuras 6.1-e, 6.1-f, são mostradas as microestruturas relativas ao tempo de 6 min. Algumas conclusões foram tiradas: (i) não se percebe alteração do tamanho de grão em relação ao encharque a 1200°C; (ii) a microestrutura continua heterogênea nos dois aços; (iii) o aço P-68Nb apresenta maior heterogeneidade da microestrutura. Além disso, não foi observada influência do tempo de encharque ao passar de 6 min para 10 min. Quando o encharque foi realizado a 1250°C por 6 min, notaram-se grãos maiores que nos encharques anteriores, com a microestrutura ainda bastante heterogênea, especialmente no aço P-68Nb. No geral, o crescimento do grão foi pequeno em relação ao encharque a 1220°C.

Analisando-se os dados, não se verificou influência significativa do tempo de encharque, no intervalo estudado, no tamanho médio de grão austenítico (TGA). Por isso, foi construído o gráfico da Figura 6.2 relativo ao tamanho de grão em função da temperatura de encharque, envolvendo todos os ensaios realizados.

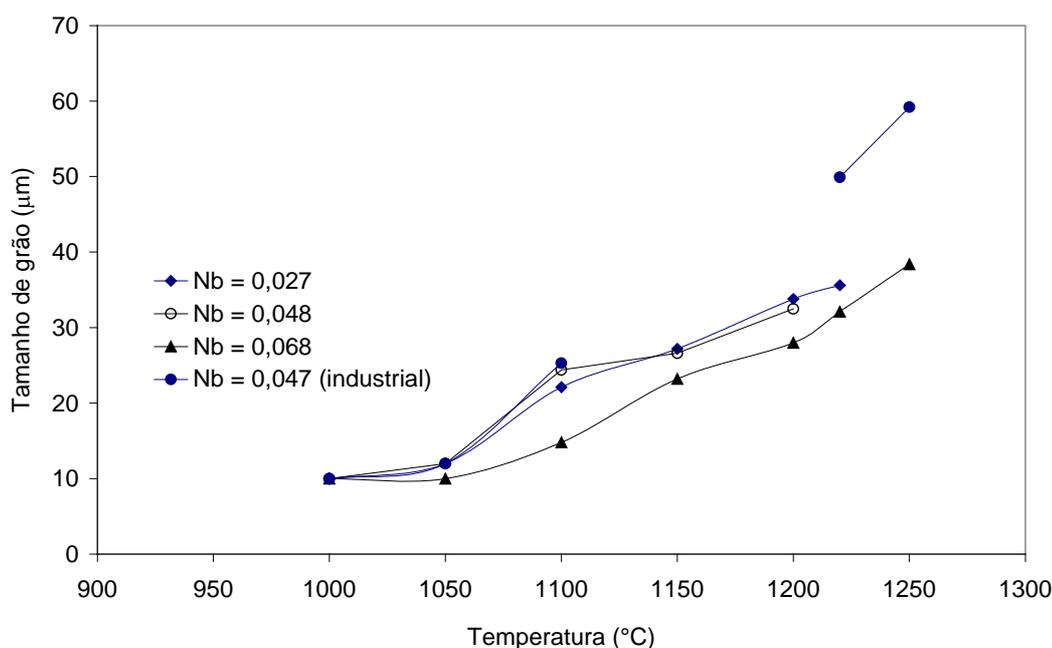


Figura 6.2 - Tamanho de grão austenítico em função da temperatura de encharque.

Observa-se que o grão cresce suavemente com o aumento da temperatura de encharque para todos os aços até cerca de 1200°C. Para o aço I-47Nb houve uma elevação súbita do TGA em temperaturas da ordem de 1200~1220°C, sugerindo uma possível solubilização mais intensa do Nb. Porém, para o aço P-68Nb, mesmo a 1250°C, não houve aumento súbito do TGA, sugerindo que maior quantidade de Nb ainda deveria estar na forma de precipitados. Esse comportamento, juntamente com as observações de grãos heterogêneos na microestrutura, indicam que a solubilização dos elementos de microliga tenha sido contínua e gradual com a temperatura, possivelmente, não se completando nem mesmo a 1250°C. Nota-se também que o aço P-68Nb apresentou, consistentemente, menor tamanho médio de grão, o que é esperado, em função de seu maior teor de Nb.

A aplicação de equações conhecidas na literatura para o produto de solubilidade do carbonitreto de Nb fornece temperaturas de solubilização bastante variadas. Tomando-

se como exemplo o aço I-47Nb, as equações deduzidas por Siciliano⁹⁸, pelo IRSID¹⁸¹ e por Irvine et al.¹⁸² fornecem os valores de 1147°C, 1245°C e 1288°C, respectivamente. Portanto, não se pode definir a temperatura de solubilização de forma precisa por estas equações.

6.2. Estrutura Austenítica após Deformação a 1080°C

As análises da microestrutura austenítica mostraram que houve recristalização estática nos 10 s decorridos após a deformação a 1080°C. Na Figura 6.3 são mostradas, como exemplo, as microestruturas obtidas após deformações verdadeiras de 0,22 e 0,36 para o aço I-47Nb. O TGA após encharque foi de 59 μm , e após tais deformações foi de 48 e 40 μm , respectivamente.

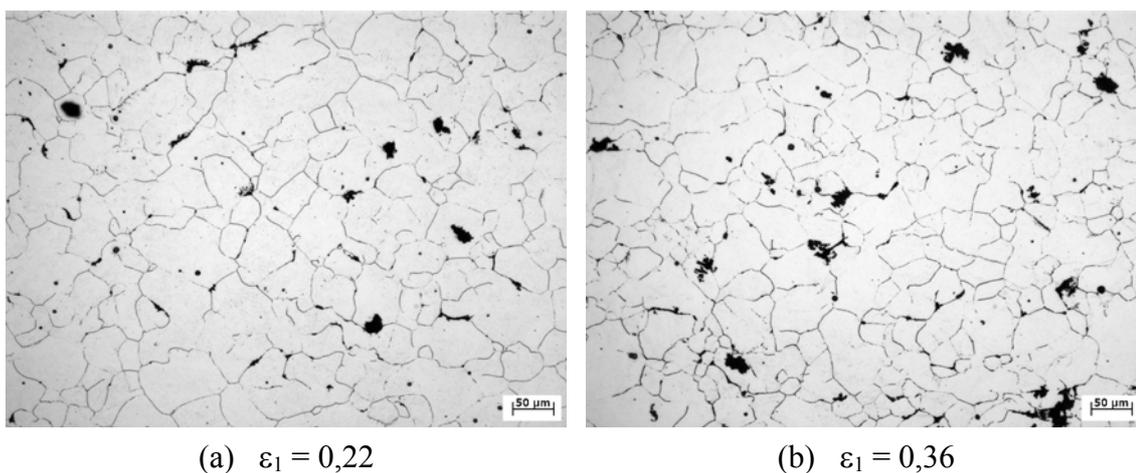


Figura 6.3 - Estrutura austenítica após deformação do aço I-47Nb a 1080°C.

Existem diversas equações propostas na literatura^{98,168,170,173} para prever o tamanho de grão recristalizado estaticamente após deformação em altas temperaturas. De acordo com Sellars¹⁶⁸, o tamanho do grão recristalizado, d_{SRX} , diminui com o aumento da deformação, ϵ , e com a redução do tamanho de grão inicial, d_0 , segundo a equação (6.1).

$$d_{\text{SRX}} = 1,1d_0^{0,67} \epsilon^{-0,67} \quad (6.1)$$

Por esta equação, os valores previstos de d_{SRX} para as deformações mostradas na Figura 6.3 seriam de 46 μm e 34 μm , partindo-se do grão inicial de 59 μm . Conclui-se, então,

que a previsão do TGA recristalizado foi boa para a menor deformação, mas ficou, a princípio, subestimada quando a deformação foi de 0,36. É possível, entretanto, que após a deformação tenha ocorrido recristalização estática completa em um tempo menor que os 10 s de espera após o passe, e que, no restante do tempo tenha havido crescimento do grão. Assim, as previsões de tamanho de grão recristalizado estariam corretas, sendo que o valor medido de 40 μm representaria o tamanho de grão crescido após recristalização.

6.3. Microestrutura após Deformação a 880°C

Como esperado, a austenita não recristalizou após a deformação a 880°C. Na Figura 6.4 são mostradas as microestruturas dos aços I-47Nb e P-68Nb, submetidos à deformação de 0,22 nesta temperatura. No último aço o grão parece mais deformado, além de mais refinado, podendo esta última característica ser atribuída ao menor grão obtido desde o encharque.

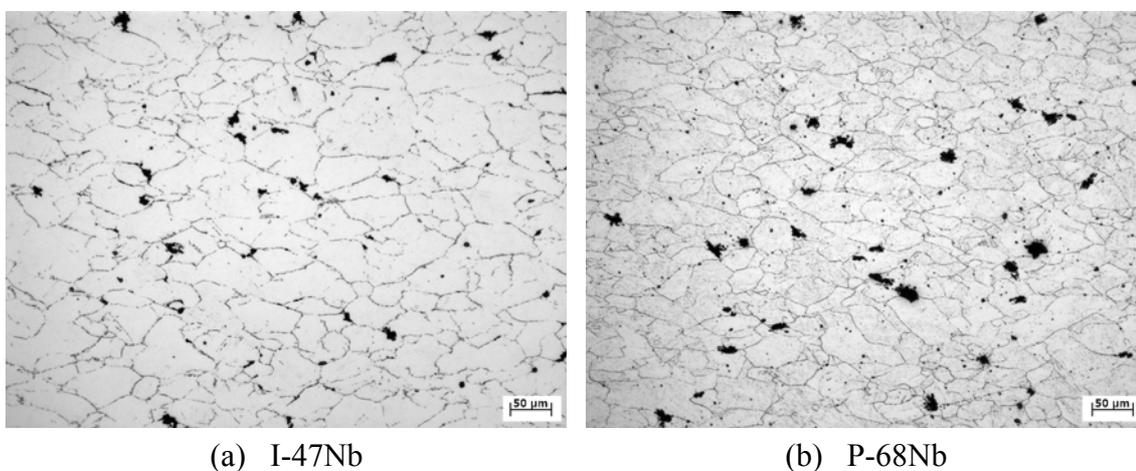


Figura 6.4 - Estrutura austenítica após deformação a 880°C.

6.4 Resumo

Neste capítulo foi apresentada a microestrutura austenítica obtida nos aços estudados em três instantes do processamento termomecânico, a saber: após o encharque e após as deformações acima e abaixo da temperatura de não-recristalização. Para temperaturas de encharque até 1000°C o grão austenítico foi homogêneo medindo cerca de 10 μm , ou

seja, não houve crescimento de grão. Não foi verificada influência do tempo de encharque, na faixa estudada entre 4 e 10 min, no tamanho de grão. Por outro lado, à medida que a temperatura de encharque aumentou houve crescimento gradual do grão austenítico, porém com microestrutura heterogênea, a qual persistiu mesmo a 1250°C. Após deformação a 1080°C e espera de 10 s, houve recristalização da microestrutura, como esperado, enquanto que a deformação a 880°C provocou encruamento da austenita sem recristalização subsequente durante o intervalo de 8 s.

7. RESULTADOS DOS ENSAIOS DILATOMÉTRICOS

Neste capítulo são apresentados exemplos de curvas do ciclo termomecânico, de curvas tensão-deformação nos passes e de curvas dilatométricas, obtidas nos ensaios. As informações preliminares extraídas das curvas dilatométricas, temperaturas de início e final de transformação, e inclinações nas regiões antes e após a transformação, são fornecidas em tabelas. Tais informações, juntamente com os resultados completos das curvas dilatométricas, tempo, temperatura e variação dimensional do corpo-de-prova, fornecem a base de dados para as análises subsequentes e o estabelecimento dos modelos matemáticos de transformação de fase.

7.1. Aspecto dos Corpos-de-prova Ensaiaados

Uma fotografia do corpo-de-prova original e de corpos-de-prova ensaiados com variadas deformações ε_2 (deformação $\varepsilon_1=0,25$) é mostrada na Figura 7.1. Nota-se um ligeiro abaulamento na região do meio de seu comprimento, conforme esperado. Em geral, o abaulamento foi simétrico em relação ao comprimento do corpo-de-prova, indicando a distribuição também simétrica de temperatura em relação ao meio do comprimento, onde é fixado o termopar.



Figura 7.1 - Fotografia do corpo-de-prova original (primeiro à esquerda) e de corpos-de-prova após ensaios com deformações $\varepsilon_1 = 0,25$, e $\varepsilon_2 = 0; 0,22; 0,36$, nesta ordem, da esquerda para direita.

7.2. Exemplos de Curvas Obtidas

Os ensaios foram identificados por números seqüenciais, os quais aparecem em tabelas e figuras no decorrer deste trabalho.

A Figura 7.2 mostra as três curvas pertinentes (ciclo térmico, tensão-deformação e dilatométrica) ao aço I-47Nb, para um dos ensaios realizados (seqüência 136: $\varepsilon_1 = 0,25$; $\varepsilon_2 = 0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$). Observa-se que o ciclo térmico real seguiu perfeitamente o ciclo objetivado, Figura 7.2-a. Nos casos em que a taxa de resfriamento programada foi de 10°C/s , o valor obtido foi ligeiramente menor depois do início da transformação, em virtude da liberação do calor de transformação. No entanto, a taxa relevante na análise da cinética de transformação é a medida até o início dessa transformação. Esta taxa foi normalmente obedecida.

A tensão de escoamento medida foi sempre crescente com as deformações aplicadas, Figura 7.2-b, mostrando que não houve recristalização dinâmica nos passes.

Com relação à curva dilatométrica, Figura 7.2-c, nota-se que, para este ensaio, a transformação iniciou-se a 708°C , conforme apontado pela seta, e progrediu de acordo como o resfriamento contínuo à taxa de 5°C/s até 600°C . Com a redução da taxa para $0,05^\circ\text{C/s}$ a partir de 600°C , a expansão térmica do corpo-de-prova devido à transformação indica que ela se completa praticamente no período de 400 s até se atingir a temperatura de 580°C .

Para comparação, são mostradas as curvas do ciclo térmico, Figura 7.3-a, e dilatométrica, Figura 7.3-b, de um ensaio realizado com o mesmo aço, em mesmas condições (seqüência 123), mas com resfriamento contínuo até a temperatura ambiente. Somente a temperatura da segunda deformação foi diferente neste caso, 880°C , (ao invés de 840°C na Figura 7.2-a), o que não afetou a análise realizada. Neste caso a transformação prolongou-se até cerca de 480°C , Figura 7.3-c.

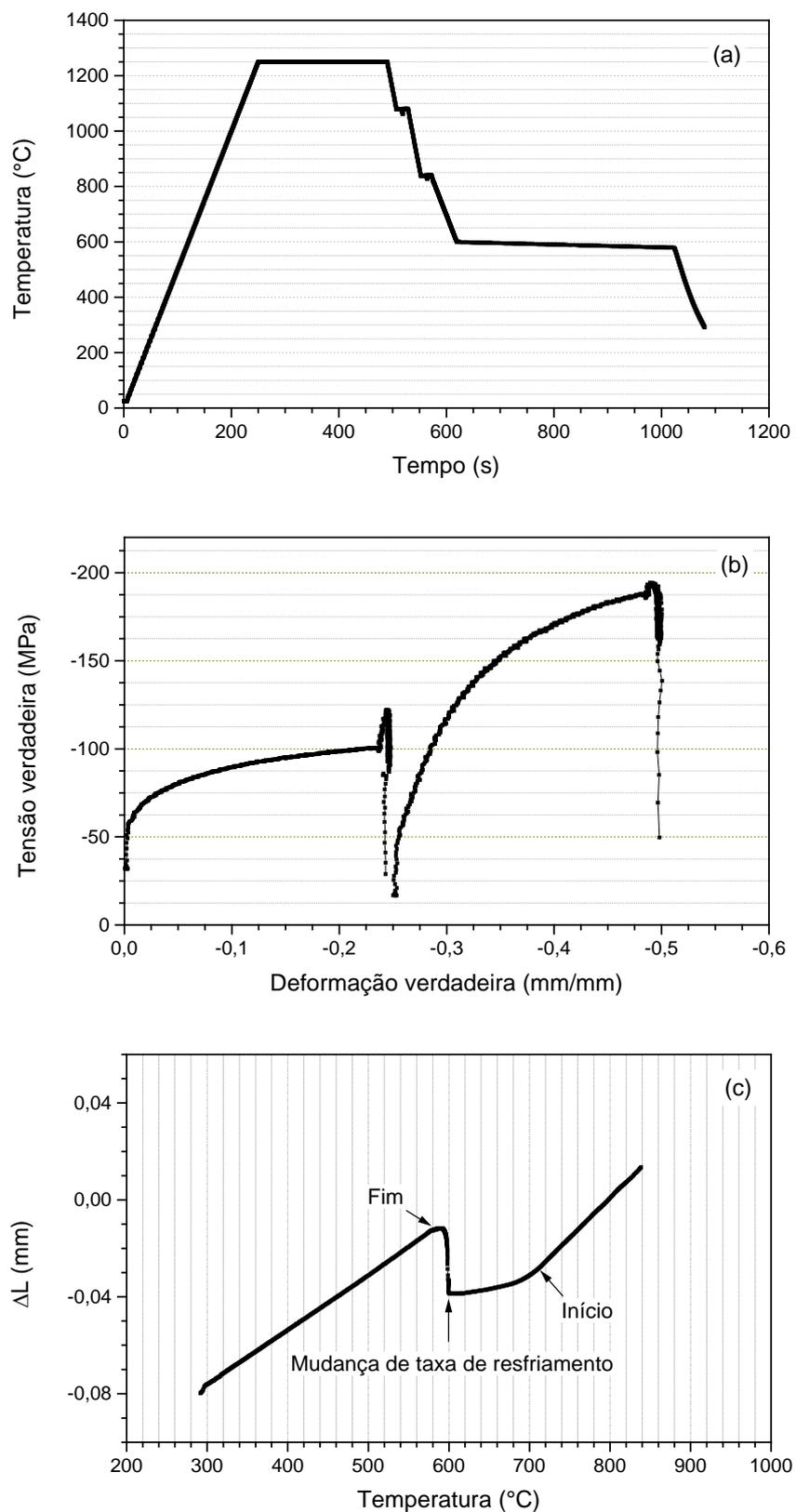


Figura 7.2 - Curvas obtidas para o ensaio com o aço I-47Nb, com $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$.

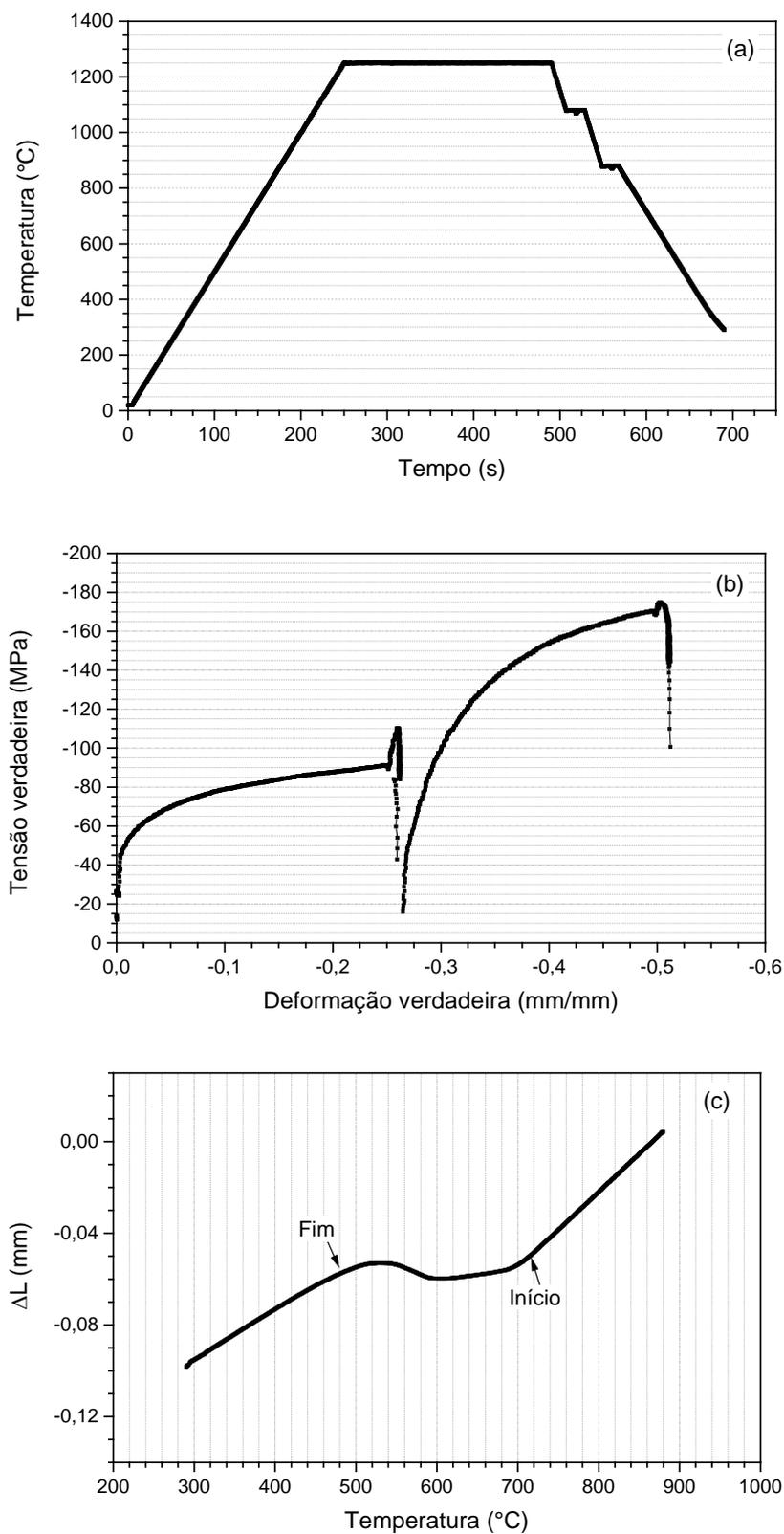


Figura 7.3 - Curvas obtidas para o ensaio com o aço I-47Nb, com $\varepsilon_1=0,25$ e $\varepsilon_2=0,22$, resfriado diretamente a 5°C/s até a temperatura ambiente.

7.3. Parâmetros das Curvas Dilatométricas

Os parâmetros preliminares obtidos diretamente da curva dilatométrica e que são de interesse para a análise da transformação são os seguintes: a temperatura Ar_3 , a temperatura de final de transformação, Ar_f , e as inclinações na região da austenita e dos produtos de transformação gerados. As Tabelas de 7.1 a 7.4 fornecem os valores dos parâmetros citados acima obtidos nos ensaios dilatométricos realizados com os aços estudados. Mostram-se ainda nestas tabelas, a taxa de resfriamento lento (normalmente $0,05^\circ\text{C/s}$), chamada TR_2 , a temperatura de final de resfriamento lento, T_f , e a temperatura do segundo passe de deformação, T_{ϵ_2} . No entanto, esta última temperatura foi variada apenas para o aço I-47Nb. Ressalta-se que os valores de deformação nos passes e de taxa de resfriamento apresentados foram os reais medidos, em vez dos valores objetivados.

Tabela 7.1 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço I-47Nb.

Ensaio	ϵ_1	ϵ_2	T_{ϵ_2} °C	TR °C/s	T_b °C	TR ₂ °C/s	T_f °C	Δt s	Ar ₃ °C	Ar _f °C	Inclinação (mm/°C)x 10 ⁴			
											Austenita		Produtos	
											Faixa (°C)	Valor	Faixa (°C)	Valor
160	0,23	0	880	5	605	0,063	580	400	669	576	870 ~ 669	2,9213	576 ~ 304	1,8456
159	0,24	0,23	880	2	Resfriamento direto				746	476	863 ~ 746	3,5951	476 ~ 310	2,2375
158	0,24	0,23	880	2	600	0,05	580	400	735	587	873 ~ 735	3,5567	587 ~ 314	2,3480
157	0,22	0,39	880	10	650	0,05	630	400	700	623	862 ~ 700	3,5715	623 ~ 466	2,6900
156	0,22	0,39	880	10	550	0,05	530	400	704	545	868 ~ 704	3,5829	545 ~ 259	2,4895
153	0,22	0,39	880	10	600	0,05	580	400	694	575	871~ 694	3,6556	575 ~ 323	2,5092
149	0,22	0,38	880	5	550	0,05	530	400	713	538	873~ 713	3,7966	538 ~ 238	2,5374
136	0,24	0,24	840	5	600	0,05	580	400	708	577	837~ 708	3,2725	577 ~ 302	2,2678
135	0,23	0,23	920	5	600	0,05	580	400	705	579	915~ 705	3,4031	579 ~ 308	2,2695
125	0,26	0,24	880	10	600	0,05	580	400	688	577	875~ 688	3,2630	579 ~ 291	2,2082
124	0,27	0,23	880	0,5	Resfriamento direto				736	549	867 ~ 736	3,7563	549 ~ 378	2,5016
123	0,25	0,23	880	5	Resfriamento direto				713	486	865 ~ 713	3,3049	486 ~ 302	2,1130
120	0,24	0,23	880	5	575	0,05	555	400	703	565	874~ 703	3,2993	565 ~ 281	2,2511
117	0,24	0,22	880	5	625	0,05	605	400	707	589	868~ 707	3,5016	589 ~ 310	2,3090
114	0,36	0,22	880	5	Resfriamento direto				708	463	878~ 708	3,5808	463 ~ 297	2,3489
113	0,35	0,24	880	5	600	0,05	580	400	715	585	872~ 715	3,4244	585 ~ 284	2,1781
112	0	0,50	880	5	600	0,05	580	400	717	590	874~ 717	3,4017	590 ~ 293	2,2953
109	0	0,22	880	5	Resfriamento direto				688	458	874~ 688	2,9601	458 ~ 247	1,9512
107	0	0,22	880	5	600	0,05	580	400	694	570	873~ 694	2,8326	570 ~ 289	1,8799
106	0	0,22	880	5	600	0,05	580	400	719	583	877~ 719	2,8640	583 ~ 297	1,9195

Ensaio	ϵ_1	ϵ_2	T_{ϵ_2} °C	TR °C/s	T_b °C	TR ₂ °C/s	T_f °C	Δt s	Ar ₃ °C	Ar _f °C	Inclinação (mm/°C)x 10 ⁴			
											Austenita		Produtos	
											Faixa (°C)	Valor	Faixa (°C)	Valor
105	0,23	0,21	880	0,5	600	0,05	580	400	748	575	875~ 748	3,5491	575 ~ 283	2,2162
104	0,23	0,21	880	11	Resfriamento direto				685	450	867~ 685	3,0567	450 ~ 282	2,1259
91	0,22	0,21	880	7,3	Resfriamento direto				701	418	864~ 701	3,2953	418 ~ 313	1,9958
90	0,24	0,21	880	0,5	Resfriamento direto				740	546	872~ 740	2,7854	546 ~ 402	2,2291
84	0,23	0,35	880	8,2	600	0,05	582	360	720	569	873 ~ 720	3,9326	569 ~ 308	2,5220
83	0,24	0,35	880	2,0	Resfriamento direto				744	ND	867 ~ 744	3,9992	460 ~ 310	2,4750
81	0,25	0	880	4,5	600	0,05	582	360	673	582	1024 ~ 673	3,0619	582 ~ 197	2,0453
80	0,25	0	880	4,9	Resfriamento direto				667	458	1058 ~ 667	2,9531	458 ~ 323	1,9374
75	0,24	0,36	880	2	Resfriamento direto				737	478	873 ~ 737	3,7415	478 ~ 314	2,3456
74	0,25	0,37	880	9	Resfriamento direto				698	487	862 ~ 698	3,8946	487 ~ 234	2,1918
73	0,25	0,37	880	4,9	Resfriamento direto				720	441	873 ~ 720	3,4836	441 ~ 284	2,7305
72	0,25	0,37	880	5,0	550	0,05	532	360	719	544	879 ~ 719	3,5854	532 ~ 288	2,3724
71	0,25	0,37	880	5,0	650	0,05	632	360	725	627	869 ~ 725	3,5979	627 ~ 461	2,6276
69	0,24	0,38	880	5,0	600	0,05	582	360	709	569	873 ~ 709	3,3406	569 ~ 335	2,0040
68	0,23	0,38	880	5,0	600	0,05	582	360	711	576	872 ~ 711	2,7630	576 ~ 487	2,0565
67	0,27	0,22	880	7,8	550	0,05	532	360	693	540	880 ~ 693	3,5389	540 ~ 351	2,3491
66	0,28	0,23	880	8,4	650	0,05	526	480	701	618	874 ~ 701	3,7195	618 ~ 382	2,4482
65	0,23	0,21	880	8,8	575	0,05	557	360	684	553	873 ~ 684	3,4775	553 ~ 265	2,1899
64	0,27	0,23	880	2	600	0,05	582	360	718	580	872 ~ 618	3,5094	580 ~ 359	2,5791
63	0,27	0,22	880	2	Resfriamento direto				722	472	875 ~ 767	3,8753	472 ~ 298	2,3100
62	0,28	0,23	880	8,9	625	0,05	607	360	690	601	872 ~ 690	3,3911	601 ~ 232	2,2869

Ensaio	ϵ_1	ϵ_2	T_{ϵ_2} °C	TR °C/s	T_b °C	TR ₂ °C/s	T_f °C	Δt s	Ar ₃ °C	Ar _f °C	Inclinação (mm/°C)x 10 ⁴			
											Austenita		Produtos	
											Faixa (°C)	Valor	Faixa (°C)	Valor
61	0,25	0,22	880	8,8	600	0,05	582	360	685	575	878 ~ 685	3,6316	575 ~ 316	1,9201
60	0,26	0,23	880	10	Resfriamento direto				690	467	873 ~ 690	3,4833	467 ~ 353	2,4076
59	0,26	0,22	880	5,0	550	0,05	532	360	708	541	871 ~ 708	3,4922	541 ~ 278	2,4745
58	0,27	0,22	880	5,0	650	0,05	626	480	707	618	870 ~ 707	3,5658	618 ~ 317	2,2420
54	0,27	0,23	880	5,0	600	0,05	582	360	700	528	863 ~ 700	3,4403	528 ~ 286	2,1509
43	0,25	0,22	880	5,0	550	0,5	450	200	714	523	871 ~ 714	3,3602	523 ~ 237	2,2291
42	0,27	0,22	880	5,0	Resfriamento direto				719	472	867 ~ 719	3,4919	472 ~ 250	2,3686
41	0,26	0,22	880	5,0	650	0,5	470	360	710	498	871 ~ 710	3,4011	498 ~ 201	2,2230
40	0,27	0,22	880	4,8	650	0,5	470	360	710	ND	870 ~ 710	3,3749	ND	ND
38	0,27	0,21	880	5,0	Resfriamento direto				713	480	865 ~ 713	3,3526	480 ~ 335	2,0937
33	0,25	0,21	880	5,0	600	0,5	450	300	715	501	874 ~ 715	3,3462	501 ~ 255	2,1587
17	0,38	0,22	880	5,0	650	0,5	470	360	705	546	871 ~ 705	3,4432	500 ~ 251	2,3475
16	0,36	0,22	880	5,0	600	0,5	420	360	711	493	8761 ~ 711	3,5004	493 ~ 212	2,1273
90-A	0,25	0,19	880	25	Resfriamento direto				676	458	872 ~ 676	8,174	458 ~ 343	4,766
74-A	0,25	0,36	880	20	Resfriamento direto				691	463	864 ~ 691	8,700	463 ~ 348	5,202
75-A	0,25	0,34	880	25	Resfriamento direto				688	452	864 ~ 688	8,609	452 ~ 351	4,883

ND: não definido

Tabela 7.2 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço P-27Nb.

Ensaio	ε_1	ε_2	TR °C/s	T _b °C	TR ₂ °C/s	T _f °C	Δt s	Ar ₃ °C	Ar _f °C	Inclinação (mm/°C)x 10 ⁴			
										Austenita		Produtos	
										Faixa (°C)	Valor	Faixa (°C)	Valor
155	0,22	0,39	10	550	0,05	530	400	700	547	868 ~ 700	3,5034	547 ~ 257	2,5001
154	0,22	0,39	10	650	0,05	630	400	705	628	875 ~ 705	3,6681	628 ~ 327	2,5170
151	0,20	0,38	10	600	0,05	580	400	708	583	868 ~ 708	3,5583	583 ~ 292	2,4229
147	0,22	0,39	5	550	0,05	530	400	723	544	876 ~ 723	3,7481	544 ~ 280	2,4765
146	0,22	0,39	5	650	0,05	630	400	715	636	865 ~ 715	3,8409	636 ~ 328	2,5285
143	0,22	0,39	5	600	0,05	580	400	716	574	854 ~ 716	3,7358	574 ~ 328	2,3920
139	0,23	0,23	10	550	0,05	530	400	705	547	877 ~ 705	3,3534	547 ~ 280	2,2556
137	0,24	0,24	10	650	0,05	630	400	702	636	878~ 702	3,5024	636 ~ 333	2,3709
133	0,23	0,23	10	600	0,05	580	400	690	591	876~ 690	3,4203	591 ~ 296	2,2871
130	0,24	0,24	5	550	0,05	530	400	713	546	872~ 713	3,4245	546 ~ 273	2,3187
126	0,26	0,24	5	650	0,05	630	400	731	641	877~ 731	3,3407	641 ~ 346	2,3366
121	0,26	0,24	5	575	0,05	555	400	718	567	873~ 718	3,4149	567 ~ 284	2,3110
118	0,26	0,24	5	625	0,05	605	400	718	603	874 718	3,2467	603 ~ 311	2,3065
102	0,25	0,22	5	575	0,05	505	400	724	572	878 ~ 724	3,2439	572 ~ 376	2,2463
55	0,27	0,23	5	600	0,05	582	360	707	569	872 ~ 707	3,4972	569 ~ 271	2,1577
45	0,26	0,22	5	650	0,5	470	360	717	567	830 ~ 717	3,1009	567 ~ 208	2,2511
35	0,26	0,22	4,8	Resfriamento direto				726	485	874 ~ 726	3,3992	485 ~ 339	2,2067
31	0,26	0,21	5	600	0,5	450	300	717	485	877 ~ 717	3,4653	485 ~ 278	2,2108
30	0,28	0,23	5	600	0,5	450	300	720	517	876 ~ 720	3,5017	517 ~ 283	2,2344
9	0,37	0,22	5	600	0,5	420	360	713	500	869 ~ 713	3,2047	500 ~ 210	2,1360
72A	0,25	0,34	20	Resfriamento direto				674	472	854 ~ 674	8,774	472 ~ 343	4,869
87A	0,25	0,18	20	Resfriamento direto				661	400	833 ~ 661	8,006	400 ~ 292	4,944

Tabela 7.3 Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço P-48Nb.

Ensaio	ϵ_1	ϵ_2	TR °C/s	T _b °C	TR ₂ °C/s	T _f °C	Δt s	Ar ₃ °C	Ar _f °C	Inclinação (mm/°C)x 10 ⁴			
										Austenita		Produtos	
										Faixa (°C)	Valor	Faixa (°C)	Valor
150	0,20	0,38	10	600	0,05	580	400	703	592	867 ~ 703	3,5338	592 ~ 281	2,4261
144-A	0,22	0,39	5	600	0,05	580	400	719	583	875 ~ 719	3,7592	583 ~ 314	2,4728
142	0,22	0,39	5	600	0,05	580	400	720	574	874 ~ 720	3,8983	574 ~ 320	2,4311
141	0,19	0,39	5	600	0,05	580	400	719	593	871 ~ 719	3,6753	593 ~ 298	2,4933
134	0,23	0,23	10	600	0,05	580	400	690	580	875 ~ 690	3,3480	590 ~ 307	2,2060
119	0,25	0,24	5	575	0,05	555	400	718	565	876 ~ 718	3,5466	565 ~ 276	2,2841
115	0,24	0,23	5	625	0,05	605	400	715	598	874 ~ 715	3,4058	598 ~ 299	2,2726
56	0,27	0,24	5	600	0,05	582	360	718	522	863 ~ 718	3,5070	522 ~ 294	2,2213
39	0,27	0,22	5	Resfriamento direto				710	497	870 ~ 710	3,5280	497 ~ 196	2,2174
34	0,26	0,22	5	600	0,5	450	300	726	ND	863 ~ 726	3,4397	481 ~ 270	2,2086
24	0,37	0,22	5	Resfriamento direto				719	467	862 ~ 719	3,2447	467 ~ 212	2,2133
13	0,36	0,22	5	600	0,5	420	360	728	ND	875 ~ 728	3,4560	540 ~ 425	2,1822
5	0,38	0,22	5	Resfriamento direto				720	504	870 ~ 720	3,6854	504 ~ 430	2,0234
73A	0,25	0,36	20	Resfriamento direto				674	462	863 ~ 673	8,673	462 ~ 345	4,899

Tabela 7.4 - Dados básicos obtidos com as curvas dilatométricas dos ensaios com o aço P-68Nb.

Ensaio	ε_1	ε_2	TR °C/s	T _b °C	TR ₂ °C/s	T _f °C	Δt s	Ar ₃ °C	Ar _f °C	Inclinação (mm/°C)x 10 ⁴			
										Austenita		Produtos	
										Faixa (°C)	Valor	Faixa (°C)	Valor
152	0,21	0,38	10	600	0,05	580	400	693	579	871~ 693	3,7846	579 ~ 297	2,5228
148	0,22	0,39	5	550	0,05	530	400	713	546	875~ 713	3,6283	546 ~ 263	2,4712
145	0,21	0,39	5	650	0,05	630	400	721	629	874~ 721	3,8523	629 ~ 333	2,5487
144-B	0,20	0,38	5	600	0,05	580	400	718	593	875~ 718	3,5342	593 ~ 281	2,3552
140	0,23	0,23	10	550	0,05	530	400	687	546	876~ 687	3,4000	546 ~ 265	2,3779
138	0,24	0,24	10	650	0,05	630	400	697	623	862~ 697	3,3838	623 ~ 345	2,3282
132	0,23	0,23	10	600	0,05	580	400	700	623	871~ 700	3,3328	594 ~ 311	2,3055
131	0,24	0,23	5	550	0,05	530	400	713	547	874~ 713	3,4007	547 ~ 271	2,3186
127	0,22	0,23	5	650	0,05	630	400	713	631	876~ 713	3,3843	631 ~ 316	2,3318
122	0,26	0,24	5	575	0,05	555	400	709	554	873~ 709	3,5382	554 ~ 294	2,3529
116	0,24	0,23	5	625	0,05	605	400	708	597	863~ 708	3,5277	597 ~ 308	2,2626
94	0,25	0,22	5	625	0,05	605	400	718	561	869~ 718	3,6783	561 ~ 275	2,3860
51	0,27	0,22	5	600	0,05	582	360	704	575	876 ~ 704	3,4224	575 ~ 323	2,2523
44	0,22	0,20	5,0	Resfriamento direto				718	477	869 ~ 718	3,3576	477 ~ 300	2,2823
36	0,26	0,21	4,6	Resfriamento direto				712	485	865 ~ 712	3,5218	485 ~ 334	2,2198
32	0,26	0,21	5,0	600	0,5	450	300	720	ND	867 ~ 720	3,2556	506 ~ 268	2,2100
23	0,36	0,22	5,1	Resfriamento direto				715	465	8675 ~ 715	3,5960	465 ~ 216	2,2921
11	0,28	0,22	5,1	600	0,5	420	360	705	477	807 ~ 705	2,9241	477 ~ 209	2,2412
71A	0,25	0,34	20	Resfriamento direto				678	457	853 ~ 678	7,658	457 ~ 391	4,462

Existem muitos ensaios com condições aproximadamente equivalentes, por exemplo níveis de deformação nos passes muito próximos. A razão para isso é que a deformação real nos ensaios por compressão não corresponde exatamente ao programado. Este valor é calculado depois do ensaio como função do posicionamento final do pistão que executa a compressão.

Uma análise detalhada dos valores de A_{r3} dos ensaios mostrou que não houve efeito significativo dessas variações de deformação na cinética de transformação. Portanto, para a análise dos resultados foram tomados, sempre, os valores de 0,25, para deformações entre 0,19 e 0,27, e de 0,36 para deformações entre 0,34 e 0,38.

7.4. Resumo

Neste capítulo foram mostrados os resultados preliminares extraídos das curvas dilatométricas, os quais são a base para a interpretação e dedução dos modelos de transformação da austenita. Foram mostrados também exemplos de curvas obtidas nos ensaios dilatométricos na Gleeble.

8. TEMPERATURA DE INÍCIO DE TRANSFORMAÇÃO

Um parâmetro fundamental no estudo da transformação da austenita em resfriamento contínuo, principalmente para seu modelamento, é a temperatura de início de transformação, A_{r3} . Baseando-se nas determinações realizadas nas curvas dilatométricas, são mostradas, neste capítulo, as influências em A_{r3} das variáveis taxa de resfriamento, deformações ε_1 e ε_2 , e teor de Nb do aço. Posteriormente, é desenvolvida uma equação para previsão da A_{r3} , onde o efeito das três primeiras variáveis é modelado por uma função de potência. A composição química do aço é considerada indiretamente na equação, por seu efeito na temperatura de equilíbrio austenita/ferrita, A_{e3} .

8.1. Método de Determinação de A_{r3} na Curva Dilatométrica

Uma breve discussão sobre o método de determinação da A_{r3} foi fornecida no item 3.7.1. No presente estudo, os valores de A_{r3} correspondem à temperatura na qual tornou-se perceptível o desvio da linearidade da curva dilatométrica durante resfriamento do corpo-de-prova na região austenítica. A A_{r3} assim determinada é chamada de temperatura “real” de início de transformação, e se diferencia da temperatura “aparente” de início de transformação, adotada por muitos pesquisadores^{13,130}, que corresponde à temperatura no momento em que a fração transformada atinge certo valor, por exemplo 0,05.

Pelo fato de a transição entre a região reta da curva dilatométrica e a região de transformação ser suave, o início de transformação não é inequivocamente definido, o que leva a certa dispersão dos dados considerando-se a mesma condição de ensaio. Por essa razão, a utilização da derivada primeira da variação dimensional do corpo-de-prova em relação à temperatura também auxiliou a determinação da A_{r3} .

Tomando-se os resultados de A_{r3} obtidos para o aço I-47Nb, foi realizada uma análise estatística para determinar a sua dispersão. Como existem muitos valores obtidos em condições similares de ensaio, foi calculado o desvio padrão ponderado com esse

conjunto de dados. A estimativa desta medida de dispersão, tomada como sendo o erro experimental na determinação de Ar_3 , foi de $\pm 5^\circ\text{C}$. Essa variação é função, evidentemente, não somente da incerteza inerente ao método de determinação, mas também às variações em torno do valor visado dos parâmetros de ensaio.

8.2. Verificação da Microestrutura no Início da Transformação

Para verificação por metalografia do início da transformação, alguns ensaios foram conduzidos de acordo com o ciclo básico mostrado na Figura 5.3, porém temperando-se os corpos-de-prova em temperaturas logo abaixo da Ar_3 . Seções metalográficas dos corpos-de-prova foram examinadas ao microscópio ótico, conforme procedimento descrito no item 5.7.

Na Tabela 8.1 são mostradas as condições dos ensaios com têmpera dos corpos-de-prova, na temperatura designada como T_i . Na última coluna, é dada a Ar_3 medida em outro ensaio similar ao que foi aplicada a têmpera. Na Figura 8.1 são mostradas as microestruturas correspondentes a estes ensaios.

Tabela 8.1 - Condições dos ensaios para têmpera do corpo-de-prova logo após o início de transformação.

Figura	Aço	ϵ_1	ϵ_2	TR ($^\circ\text{C/s}$)	T_i ($^\circ\text{C}$)	Ar_3 ($^\circ\text{C}$)
8.1-a	I-47Nb	0,22	0,22	5	700	709
8.1-b	I-47Nb	0,18	0,23	5	700	709
8.1-c	I-47Nb	0,39	0,31	5	700	ND
8.1-d	P-27Nb	0,23	0,22	5	707	719
8.1-e	P-48Nb	0,19	0,21	5	716	717
8.1-f	P-48Nb	0,23	0,56	5	713	ND

ND: não determinado

Observa-se na Figura 8.1 a presença de fina camada de ferrita proeutetóide, formada nos contornos de grão austeníticos. Nas fotomicrografias (a) e (b), onde as microestruturas foram congeladas na temperatura 9°C abaixo da Ar_3 determinada nas curvas dilatométricas para o aço I-47Nb, a quantidade de ferrita proeutetóide é muito pequena. A microestrutura (c) é proveniente de um corpo-de-prova cujas deformações ϵ_1 e ϵ_2

foram maiores que nas condições (a) e (b). É evidente o refino do grão austenítico e a maior quantidade de ferrita formada. Neste caso, a A_{r3} deve ter sido acima de 709°C , devido ao efeito das maiores deformações.

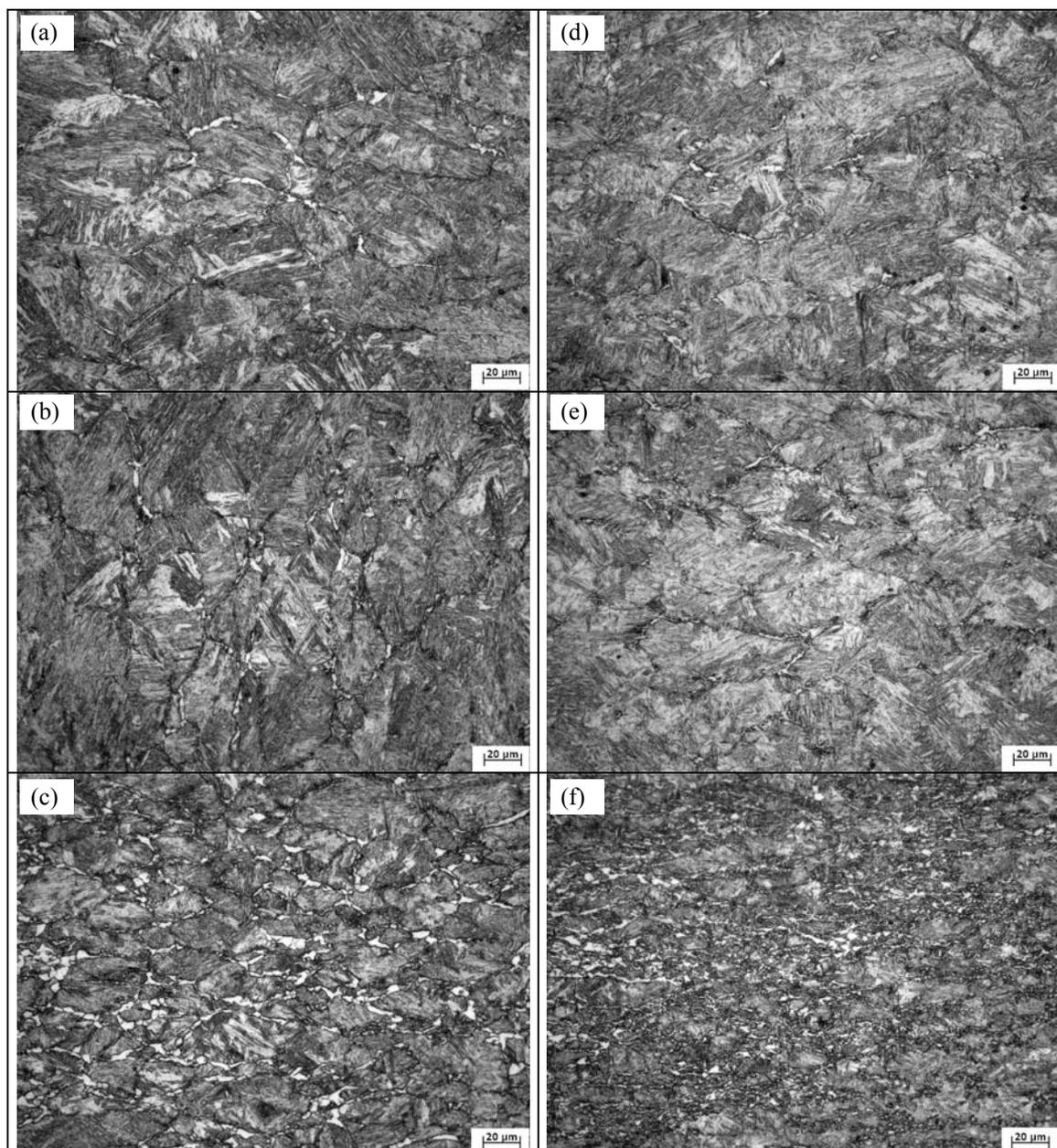


Figura 8.1 - Fotomicrografia das microestruturas logo após o início de transformação, ataque nital 4%. As regiões brancas são ferrita proeutetóide nos contornos dos grãos austeníticos.

Para os aços P-27Nb e P-48Nb, deformados em temperaturas logo abaixo da A_{r3} , nota-se a presença de quantidade mínima de ferrita nos contornos dos grãos austeníticos

originais, figuras 8.1-d e 8.1-e. Porém, quando foi imposta maior deformação ε_2 ao corpo-de-prova do aço P-48Nb, Figura 8.1-f, ocorreu um refinamento mais intenso do grão austenítico, resultando em maior formação de ferrita até a temperatura de têmpera, 713°C. Isso mostra novamente o efeito significativo da deformação ε_2 em elevar a temperatura de início de transformação.

8.3. Influência de Parâmetros de Processo na A_{r3}

Considerando-se que os valores de A_{r3} determinados na curva dilatométrica foram validados pelas observações metalográficas, foram analisados os efeitos da taxa de resfriamento e das deformações aplicadas na austenita na temperatura de início de transformação, considerando-se o conjunto global de ensaios realizados com o aço I-47Nb. A escolha deste aço deve-se à maior quantidade de ensaios realizados com este material.

8.3.1. Efeito da taxa de resfriamento

O efeito da taxa de resfriamento em A_{r3} no aço I-47Nb, para deformação $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$, tomando-se todos os ensaios com corpos-de-prova de 20 mm por 10 mm, é mostrado na Figura 8.2. Nota-se claramente que a A_{r3} diminui com o aumento de TR, conforme esperado^{108,113,126}. Nos resultados obtidos, existe, entretanto, certa dispersão para uma mesma condição de ensaio, o que é decorrente de erros inerentes aos experimentos.

Visando-se melhor interpretação do efeito das variáveis em A_{r3} e, tendo em mente o objetivo final de desenvolvimento de um modelo de previsão deste parâmetro, foram calculadas suas médias aritméticas para cada condição de ensaio. Na Tabela 8.2 são mostrados os valores médios obtidos, tendo sido incluídos os resultados com os corpos-de-prova de 15 mm por 6 mm resfriados em taxas superiores a 10°C/s. Os valores de tamanho de grão austenítico após a primeira deformação são dados na quarta coluna. Na última coluna desta tabela foram colocados os valores calculados pela equação desenvolvida, a qual é apresentada no final deste capítulo.

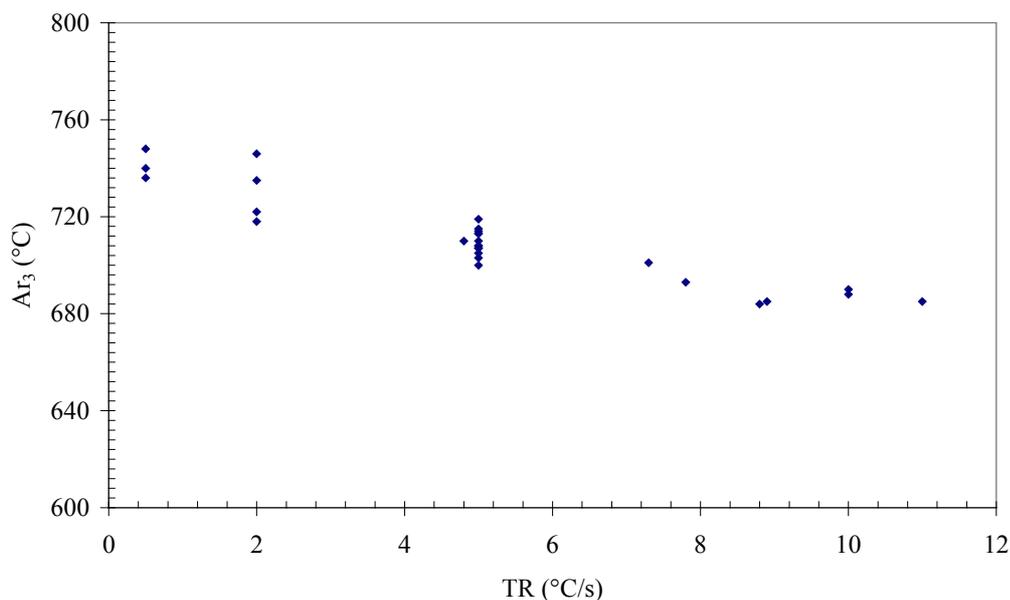


Figura 8.2 - Efeito da taxa de resfriamento na Ar_3 no aço I-47Nb, com deformações $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$.

Tabela 8.2 - Temperaturas de início de transformação médias para o aço I-47Nb.

ε_1 (mm/mm)	ε_2 (mm/mm)	TR (°C/s)	$d\gamma$ (μm)	Ar_3	
				medida (°C)	modelo (°C)
0	0,22	5,0	59	691	698
0	0,5	5,0	59	717	708
0,25	0	5,0	48	670	665
0,25	0,22	0,5	48	741	746
0,25	0,22	2,0	48	729	726
0,25	0,22	5,0	48	709	709
0,25	0,22	7,3	48	701	701
0,25	0,22	7,8	48	693	700
0,25	0,22	10,0	48	687	694
0,25	0,22	24,0	48	676	673
0,25	0,36	2,0	48	741	731
0,25	0,36	5,00	48	717	715
0,25	0,36	8,6	48	709	704
0,25	0,36	10,0	48	699	701
0,25	0,36	20,0	48	691	685
0,25	0,36	24,0	48	688	681
0,36	0,22	5,0	40	710	710

Para a condição padrão de ensaio, $\varepsilon_1 = 0,25$, $\varepsilon_2 = 0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$, o valor médio de Ar_3 foi de 709°C , com a temperatura da segunda deformação, ε_2 , de 880°C . Quando esta

temperatura foi alterada para 920°C ou 840°C, os valores de Ar_3 foram 705°C e 708°C, respectivamente. Esses dados não permitem indicar efeito significativo desta temperatura na transformação da austenita, pois estão dentro da margem de erro experimental, $\pm 5^\circ\text{C}$. Isto era esperado em função do valor da temperatura de não recristalização, T_{nr} , medida para este aço, de 958°C. Uma vez que todas as três temperaturas de deformação citadas estão abaixo da T_{nr} , a alta densidade de deslocamentos na austenita, devida à deformação em cada temperatura, não é significativamente reduzida até o início da transformação. Na verdade, seria esperada uma redução dessa densidade de deslocamentos devido ao fenômeno de recuperação, sendo esta a razão de terem sido testadas duas temperaturas de aplicação da deformação ε_2 , fora da condição básica. Mas com os resultados obtidos, a variável temperatura da segunda deformação não foi mais considerada nas análises subsequentes neste capítulo.

Quando são colocados em gráficos os pontos (TR, Ar_3) da Tabela 8.2, para a condição base $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$, nota-se claramente a forma de dependência entre essas variáveis: à medida que TR aumenta, a Ar_3 diminui de uma forma não linear, Figura 8.3. Mostra-se também nesta figura o erro médio experimental.

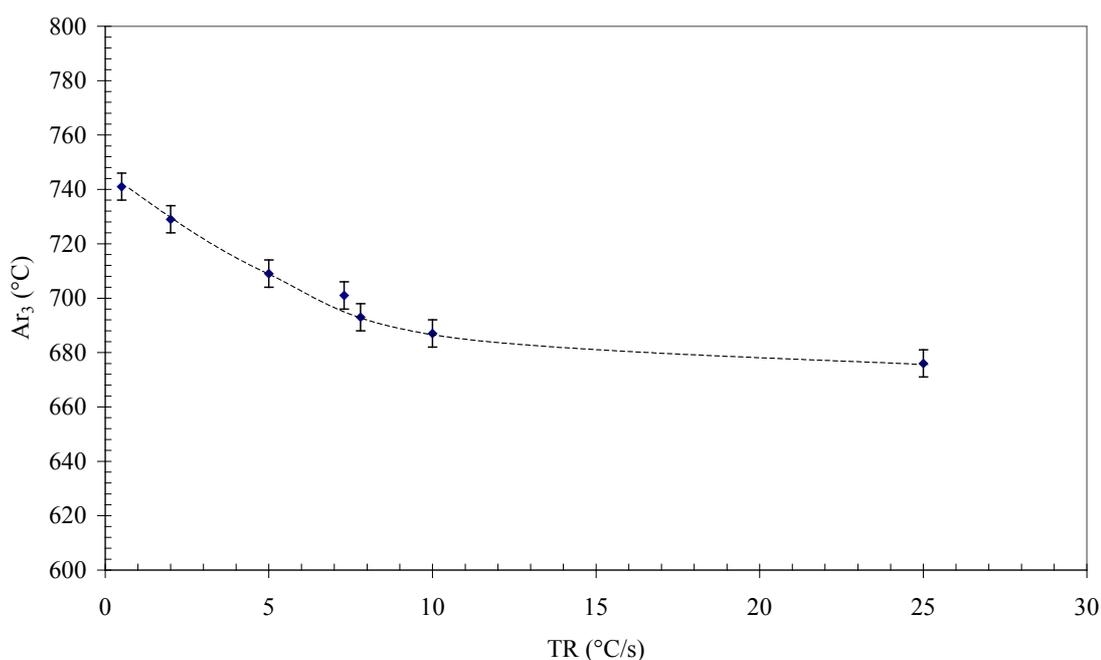


Figura 8.3 - Efeito da taxa de resfriamento em Ar_3 média para o aço I-47Nb, na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$.

Observa-se na literatura^{65,113,161} que o efeito da taxa de resfriamento na Ar_3 tem sido descrito, na maioria das vezes, como uma função de potência. Em poucos casos tem sido usada uma função logarítmica, combinada ou não com a função de potência. Em vista disso, no intuito de encontrar a forma funcional adequada para descrever a dependência de Ar_3 com TR, foi traçado o gráfico $\ln(Ar_3) \times \ln(TR)$ mostrado na Figura 8.4. Conforme esperado, os pontos experimentais situaram-se bastante próximos de uma reta, cujo o melhor ajuste forneceu um coeficiente de determinação $r^2 = 0,95$. Este resultado indica que a dependência procurada pode ser descrita como uma forma de potência, do tipo dado na equação (8.1), sendo m uma constante.

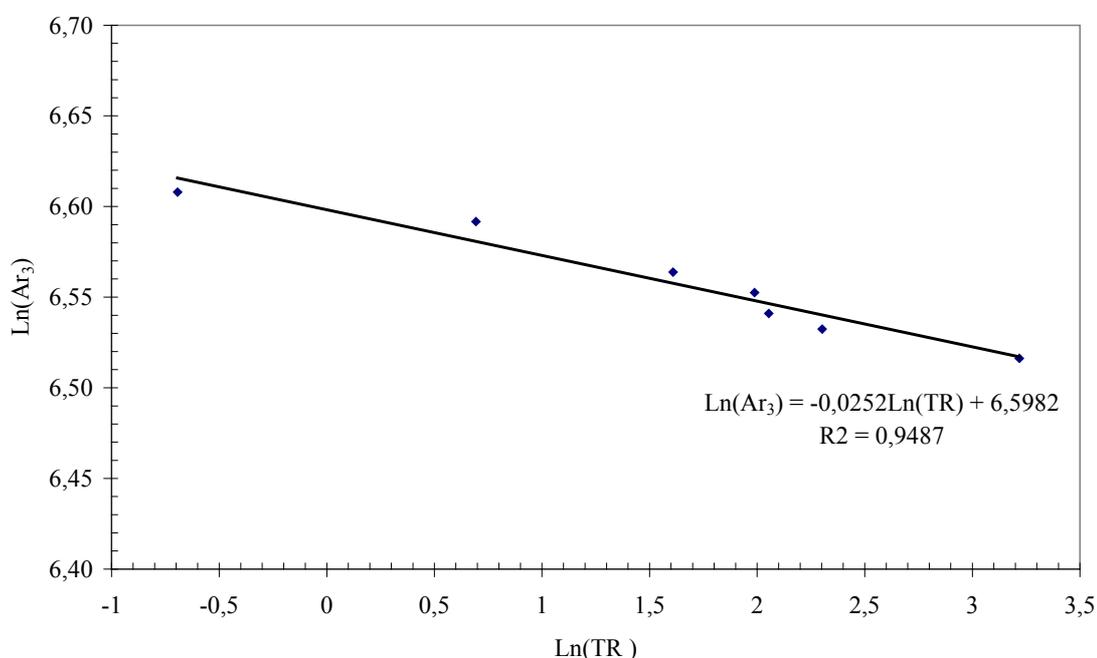


Figura 8.4 - Gráfico bilogarítmico do efeito de TR em Ar_3 no aço I-47Nb, na condição de ensaio $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$.

$$Ar_3 \propto TR^m \quad (8.1)$$

Entretanto, o gráfico da Figura 8.4 refere-se apenas aos resultados onde a deformação ε_2 foi de 0,22. Para se construir uma equação do tipo (8.1), é necessário que este tipo de dependência fosse também válido em outras condições de ensaio.

O gráfico da Figura 8.5 mostra a dependência de Ar_3 com TR para a condição de ensaio ($\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,36$). As curvas de potência de melhor ajuste aos pontos são também

mostradas nesse gráfico. Pode-se observar que as dependências de Ar_3 com TR são similares, nos dois níveis de deformação. Foi incluído no gráfico o resultado experimental de Ar_3 para a condição ($\epsilon_1 = 0,25$ e $\epsilon_2 = 0$), tendo sido traçada uma linha pontilhada passando por este ponto como suposição apenas do comportamento esperado, com base no perfil observado para os dois níveis de deformação não nulos.

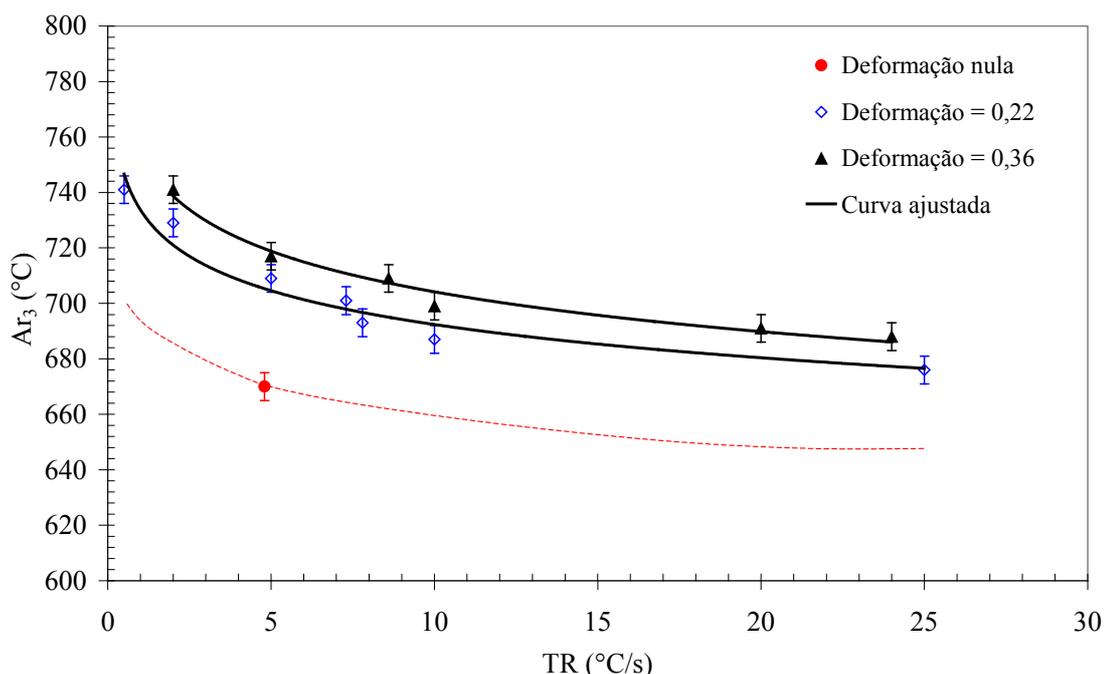


Figura 8.5 - Efeito da taxa de resfriamento em Ar_3 média para o aço I-47Nb, em três níveis de deformação da austenita na região de não-recristalização.

A dependência de Ar_3 com a deformação será comentada em detalhes no item seguinte, mas pode-se observar que o aumento da deformação eleva a temperatura de início de transformação da austenita para ferrita, fato este esperado e em acordo com a literatura^{104,105,108}.

Na Figura 8.6 é mostrado o gráfico bilogarátmico de Ar_3 em função de TR, nos três níveis de deformação ϵ_2 , e com $\epsilon_1 = 0,25$. O comportamento linear observado para a deformação $\epsilon_2=0,25$ foi também obtido para $\epsilon_2=0,36$. Além disso, as duas retas de melhor ajuste aos pontos experimentais são praticamente paralelas, mostrando que um expoente único para TR seria capaz de descrever o efeito em Ar_3 nos níveis de

deformação estudados. Essas observações indicam que, em um modelo para Ar_3 , a dependência funcional na forma de expoente para TR deve fornecer um bom ajuste.

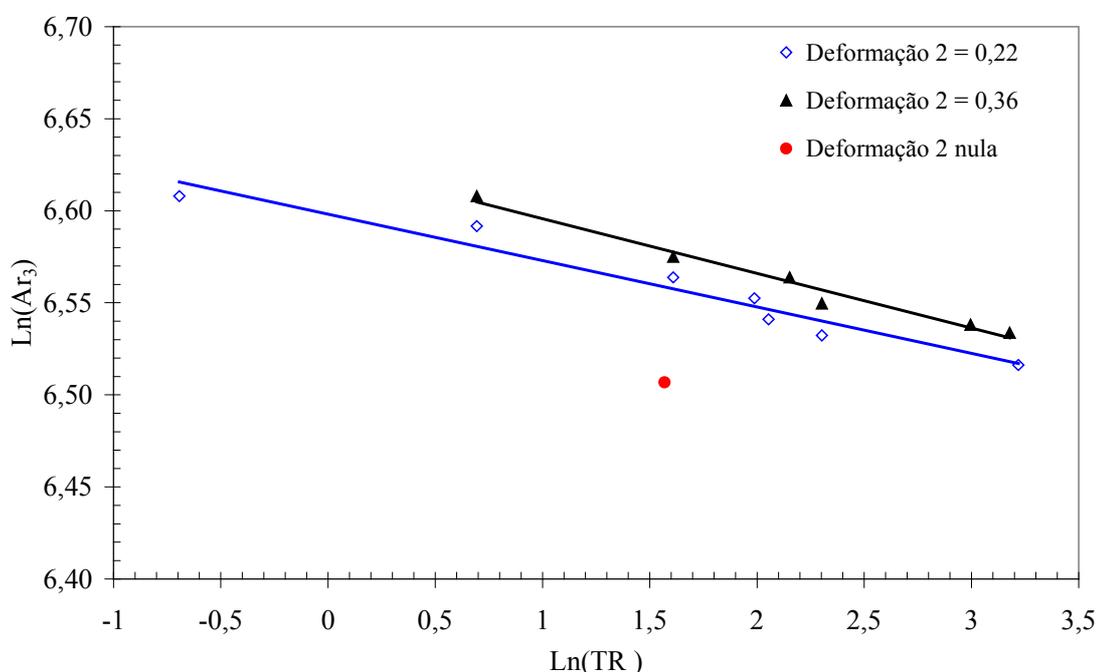


Figura 8.6 - Gráfico bilogárptico do efeito de TR em Ar_3 do aço I-47Nb, nos três níveis de deformação abaixo da temperatura de não recristalização.

Uma análise similar à exposta acima, porém com menos detalhes devido à menor quantidade de resultados experimentais, foi conduzida para os outros aços estudados. Em todos os casos, a forma de dependência potencial foi também considerada apropriada para descrever o efeito da taxa de resfriamento na temperatura de início de transformação.

8.3.2. Efeito da deformação abaixo de T_{nr}

Quanto mais encruada a austenita mais alta a temperatura de início de transformação, desde que a deformação esteja abaixo de um limite acima do qual existe uma saturação deste efeito. Esta influência é bem estabelecida. Porém, a quantificação deste efeito por relações matemáticas não se encontra ainda igualmente definida. Entre as poucas equações disponíveis na literatura, encontram-se dependências de Ar_3 com a deformação nas formas linear¹⁸³, exponencial¹¹³ e de potência¹¹⁹.

Avaliando-se os dados obtidos no presente trabalho, a melhor aproximação matemática dos resultados experimentais pareceu ser na forma de potência, como se depreende do gráfico mostrado na Figura 8.7. Para possibilitar o cálculo de valores de logaritmos, foi atribuído o valor arbitrário de 0,01 à deformação nula. A função ajustada aos pontos foi como se vê, uma forma de potência, sendo que esta avaliação preliminar sugere que, similarmente à taxa de resfriamento, também a dependência com ε_2 da A_{r3} possa ser descrita por esta função, segundo a equação (8.2), sendo n uma constante.

$$A_{r3} \propto \varepsilon_2^n \quad (8.2)$$

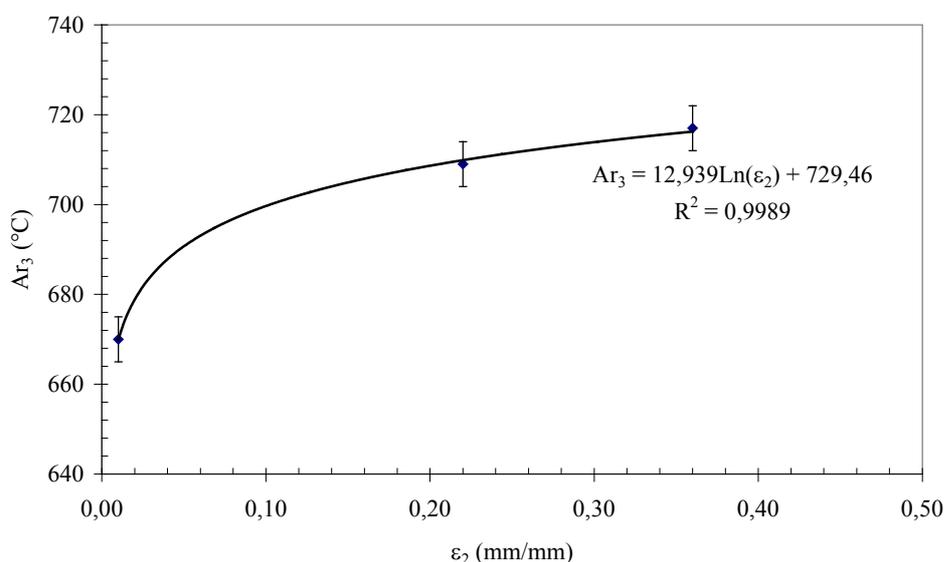


Figura 8.7 - Efeito da deformação ε_2 em A_{r3} no aço I-47Nb, na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$.

Realmente, quando os pontos experimentais da condição base foram colocados em gráfico bilogarítmico houve um ótimo alinhamento, como mostrado no gráfico da Figura 8.8. Nesta figura foram acrescentados os resultados para as taxas de resfriamento de 10°C/s e 24°C/s . Para estas taxas, como não foram obtidos três pontos, não se pode fazer ajuste de função matemática, mas foram traçadas curvas sugestivas (tracejadas) do comportamento de A_{r3} , mantendo-se a inclinação obtida na menor taxa. Na realidade, os pontos experimentais para as taxas de resfriamento mais elevadas indicam inclinações ligeiramente menores que para a taxa mais baixa. É possível que haja um efeito cruzado

de taxa de resfriamento e deformação da austenita, que se torna mais significativo à medida que tais variáveis aumentam, ou seja, se a taxa é muito elevada o efeito da deformação tende a ser suprimido, e vice-versa. Porém, nos níveis avaliados dessas variáveis tal efeito cruzado não parece muito significativo, de forma que poderia ser considerado como razoável aproximação o paralelismo entre os alinhamentos de pontos experimentais no gráfico bilogarítmico.

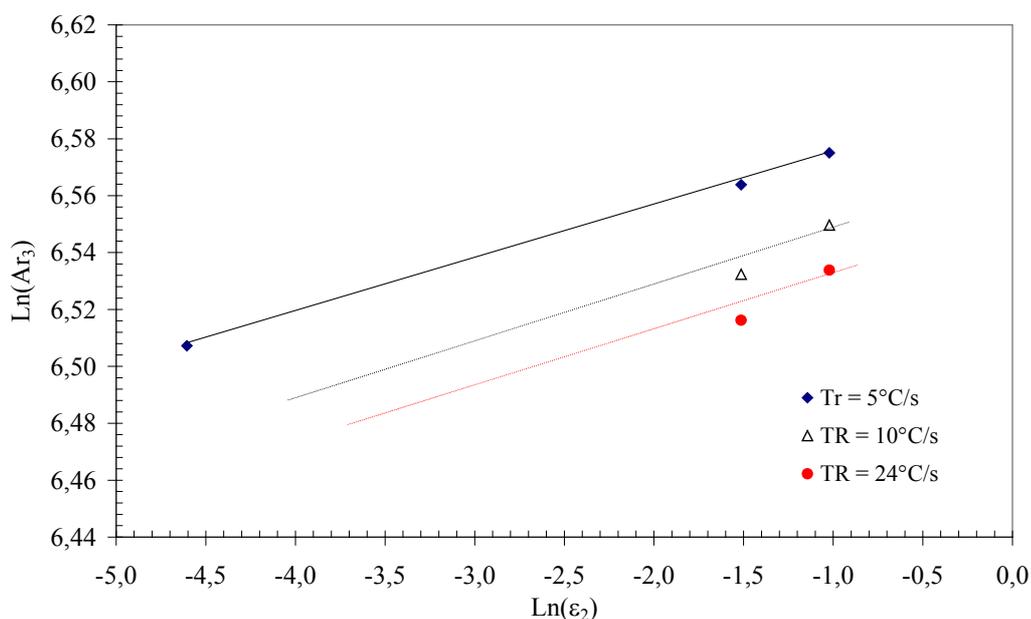


Figura 8.8 - Gráfico bilogarítmico mostrando o efeito de ϵ_2 em Ar_3 .

O efeito da deformação em aumentar Ar_3 ocorre também nos aços de uma forma geral, porém é mais significativo naqueles microligados, onde a quantidade de recuperação e recristalização após a deformação (abaixo de T_{nr}) é limitada. A explicação básica para esse efeito da deformação é encontrada no trabalho de Tamura⁹², que postulou que a deformação aumenta os locais de nucleação da ferrita, conforme discutido no item 3.5.2 da revisão bibliográfica.

8.3.3. Efeito da deformação acima de T_{nr}

A deformação ϵ_1 , que foi aplicada acima da temperatura de não-recristalização, causa o refinamento de grão austenítico, pelo mecanismo de recristalização estática, nas

condições de ensaio utilizadas. Este refinamento do grão já foi aqui mostrado pelas análises de microestrutura. Quanto maior a deformação, menor o tamanho do grão recristalizado o que aumenta a densidade de sítios (área de superfície de grão por unidade de volume), favorecendo a cinética de transformação. Portanto, espera-se uma elevação da A_{r3} à medida que se aumenta a deformação aplicada acima de T_{nr} .

A análise da influência da deformação acima de T_{nr} na cinética de transformação tem sido feita, muitas vezes¹⁶⁹⁻¹⁷¹, de uma forma indireta pelo efeito do tamanho de grão austenítico prévio recristalizado. Neste caso é necessário um modelo microestrutural para previsão do tamanho de grão antes da transformação. Por outro lado, a alternativa de se aplicar a deformação acima de T_{nr} nos modelos de transformação se torna atraente do ponto de vista de aplicação industrial, pois tal deformação é obtida diretamente dos dados coletados no processo. Esta foi a opção adotada primeiramente neste estudo.

Para se verificar este efeito, foram utilizados novamente os dados da Tabela 8.2, selecionando-se aqueles com a condição base ($\varepsilon_2 = 0,25$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$), e variando-se ε_1 , para o aço I-47Nb. O gráfico obtido de A_{r3} em função de ε_1 é mostrado na Figura 8.9. Observa-se que, realmente, a transformação de fases ocorre em temperaturas mais elevadas à medida que esta deformação aumenta. Além disso, foi realizado um ótimo ajuste dos pontos experimentais a uma curva na forma de potência, como pode ser observado nesta figura.

De forma análoga ao que foi apresentado para os efeitos das variáveis TR e ε_2 , o ajuste na forma de potência obtido significa que a dependência matemática de A_{r3} com ε_1 pode ser colocada segundo a equação (8.3), sendo p uma constante. Realmente, o gráfico mostrado na Figura 8.9, na forma bilogarítmica, indica que tal forma de dependência parece válida.

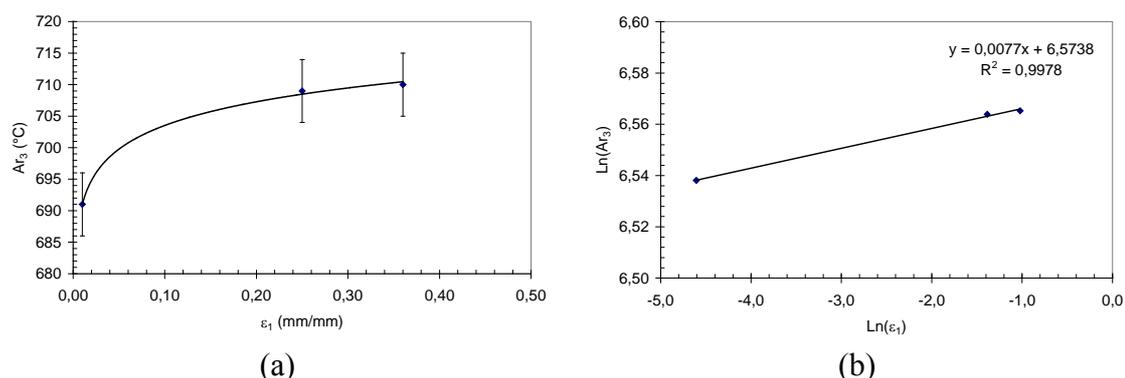


Figura 8.9 - Efeito da deformação acima de T_{nr} em A_{r3} do aço I-47Nb na condição base de ensaio, $TR = 5^\circ\text{C/s}$ e $\epsilon_2 = 0,25$, em (a); gráfico bilogarítmico entre A_{r3} e ϵ_1 , em (b).

$$A_{r3} \propto \epsilon_1^p \quad (8.3)$$

8.3.4. Influência do teor de Nb e do processo do aço, industrial ou piloto, em A_{r3}

Os gráficos das Figuras 8.10 e 8.11 mostram como os valores de A_{r3} dependem da taxa de resfriamento, mantidos os níveis de deformação e $\epsilon_2=0,36$, e variando-se as composições químicas dos aços.

Na Figura 8.10, o valor máximo de TR foi de 10°C/s pois não foram levantados dados, na deformação $\epsilon_2=0,22$, em taxas elevadas para os aços P-27Nb e P68-Nb, e, em função da representação gráfica com menor quantidade de pontos, possibilitar melhor visualização. Nesta figura foram rotulados os valores para facilitar a comparação. Uma simples observação dos dados desta figura sugere uma tendência de abaixamento da temperatura de início de transformação à medida que o teor de Nb do aço aumenta, comparando-se os três aços produzidos na escala piloto. Parece também que o aço produzido em escala industrial tem uma tendência de temperaturas mais baixas de transformação, especialmente na faixa de TR entre 4 e 10°C/s . No entanto, é constatado também nos dados desta figura que a variação máxima entre os valores de A_{r3} , para cada nível de TR, é de 10°C , que fica dentro da faixa de erro experimental de $\pm 5^\circ\text{C}$. Mesmo que possa haver, realmente, alguma influência do teor de Nb ou da rota de produção do aço em A_{r3} , tal influência seria desprezível do ponto de vista tecnológico, uma vez que no processo industrial de laminação a quente um controle de temperatura

dentro de faixa inferior a 10°C não pode ser obtido, mesmo em equipamentos e processos que possuem o estado-da-arte de tecnologia.

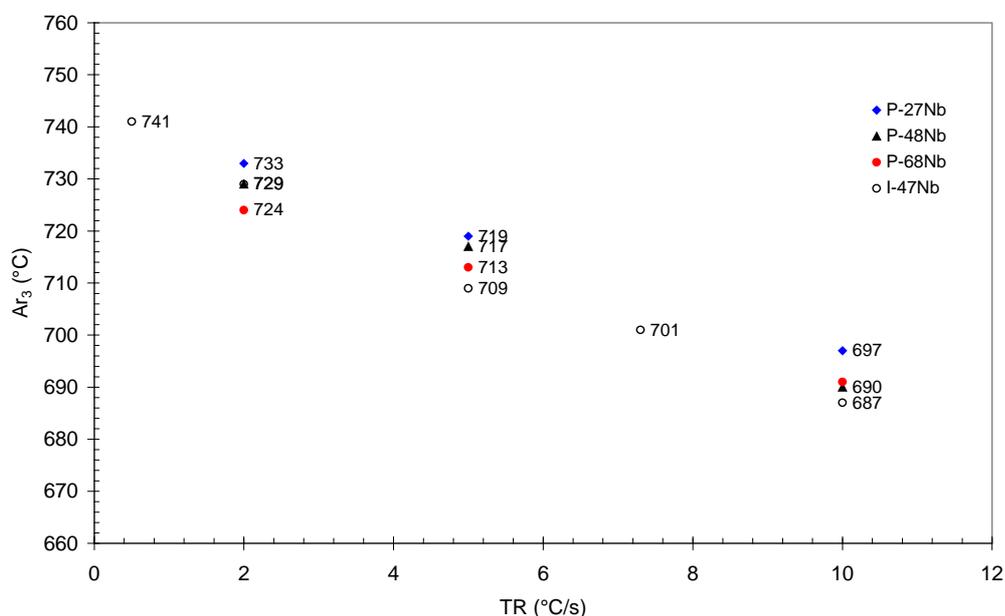


Figura 8.10 - Efeito do Nb e da rota de produção na temperatura de início de transformação, para ensaios na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,22$.

As possíveis tendências de efeito do teor de Nb e da rota de produção apontadas no parágrafo anterior ficariam então invalidadas pela simples comparação dos dados mostrados na Figura 8.11. Os rótulos dos dados não foram colocados nesta figura, pois eles ficariam sobrepostos, impossibilitando sua leitura. No nível de deformação ε_2 de 0,36, não são observadas tendências nem do efeito do Nb nem da rota de produção, considerando-se valores de TR entre 2 e 10°C/s . Para valores de TR da ordem de $20 \sim 25^{\circ}\text{C/s}$, o aço processado em escala industrial apresentou Ar_3 superior aos aços produzidos em escala piloto, não tendo sido verificada variação entre estes. Tendo em mente uma futura aplicação dos resultados deste estudo ao processo industrial, deve-se dar mais ênfase aos dados obtidos em níveis de deformação ε_2 maiores, uma vez que a deformação aplicada abaixo de T_{nr} , nas laminações tanto de chapas grossas quanto de tiras a quente, em aços microligados, são usualmente maiores que 0,22. Portanto, os resultados obtidos não indicam efeitos significativos nem do teor de Nb nem da rota de produção em Ar_3 , exceto para o nível de ε_2 de 0,36 e TR da ordem de 20°C/s , quando caberia uma análise microestrutural mais detalhada.

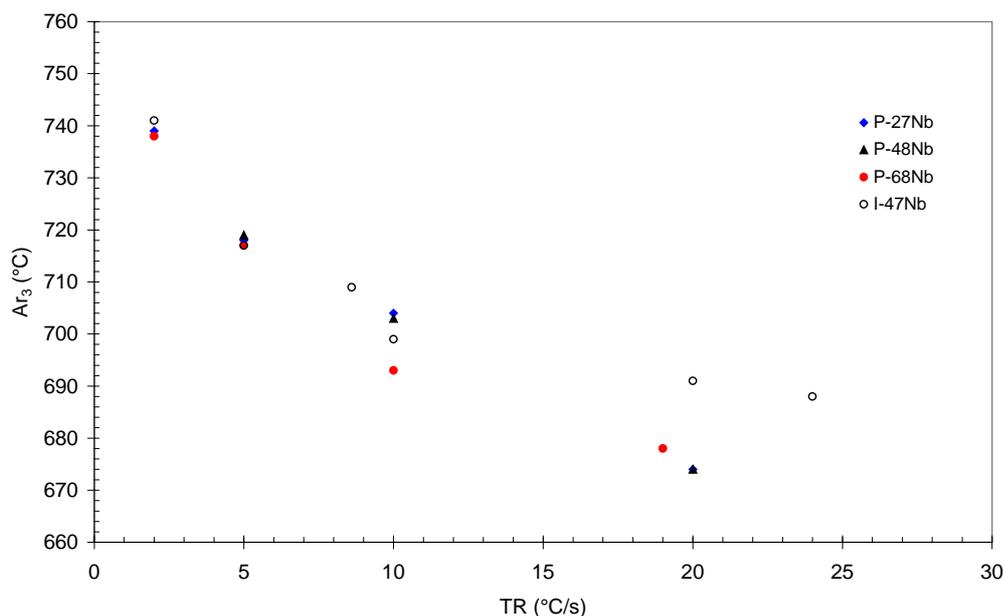
(a) $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,36$

Figura 8.11 - Efeito do Nb e da rota de produção na temperatura de início de transformação para ensaios na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $\varepsilon_2 = 0,36$.

Além disso, observa-se na literatura que não existe consenso sobre o efeito do Nb no valor de Ar_3 . Blas¹⁸⁴ determinou uma correlação para prever a Ar_3 em aços com Nb de 0,028% a 0,094%, onde Ar_3 sobe com o aumento do Nb. Aplicando-se esta relação aos aços estudados, os valores de Ar_3 seriam iguais a 706°C, 712 e 717°C, respectivamente para os aços com Nb de 0,027%, 0,047% e 0,067%, na condição básica de ensaio. A diferença máxima entre os aços, de 11°C, corresponde praticamente ao extremo do intervalo de erro experimental. No estudo de Yuan¹⁸³, também em aços CMnNb, o teor de Nb variou de 0,001% a 0,038%, e o seu efeito na Ar_3 foi parabólico, ou seja, entre 0,001% e 0,023%, a tendência foi de reduzir a Ar_3 e, entre 0,023% e 0,038%, a tendência foi oposta. Este efeito foi muito mais pronunciado que no estudo de Blas¹⁸⁴. Assim, adotou-se neste trabalho, por simplicidade, desconsiderar o teor de Nb como variável independente importante na determinação de Ar_3 , frente a importância evidente das demais variáveis aqui estudadas.

8.4. Modelo de Previsão da Ar₃

Além de entender qualitativa e quantitativamente o efeito das variáveis de ensaio na Ar₃, é importante sua previsão através de modelos matemáticos ou equações. Na ausência de deformação retida na austenita em aços CMn comuns, existem algumas equações na literatura para cálculo da Ar₃, sendo citadas a seguir duas dessas equações. Uma delas equações é a de Choo¹⁶¹, dada por (8.4).

$$Ar_3 = 925,95 - 494,74\%C - 64,8\%Mn - 10TR^{0,5} \quad (8.4)$$

Na equação (8.4) não é considerado o efeito do tamanho de grão austenítico, que é uma importante variável que influencia na cinética de transformação. A equação obtida por Santos et al.¹⁵ para aços CMn leva em consideração todas as variáveis que influem na transformação, sendo dada em (8.5).

$$Ar_3 = 874,44 - 512,0465\%C - 40,915\%Mn + 23,075\%Si + 567,126(\%C)^2 - 199,551(\%C\%Mn) + 265,797(\%C\%Si) + 4,148A - 1,03TR^{0,5} - 11,334\ln(TR) \quad (8.5)$$

Nesta equação, o parâmetro A é calculado pela expressão seguinte.

$A = -2\ln(20d\gamma/10000)/\ln(2)$, é o tamanho de grão ASTM, e $d\gamma$ o tamanho de grão austenítico, em μm .

Blas¹⁸⁴ obteve a equação (8.6) para aços baixo C baixo Mn e microligados ao Nb, após serem laminados em escala piloto acima de 940°C e resfriados com taxas entre 1 e 35°C/s. Não foi variada neste estudo a deformação na escala de passes, de forma que o seu efeito não foi considerado na correlação.

$$Ar_3 = 903 - 328\%C - 102\%Mn + 116\%Nb - 0,909TR \quad (8.6)$$

A equação (8.7), de Ouchi¹⁰⁴, desenvolvida para aços microligados ao Nb e processados por laminação controlada em chapas grossas com redução acumulada abaixo de 900°C

maior que 50%, foi deduzida para resfriamento ao ar, de forma que um termo incluindo a espessura da chapa, t (mm), foi introduzido, visando levar em conta esse efeito.

$$Ar_3 = 910 - 310\%C - 80\%Mn - 20\%Cu - 15\%Cr - 55\%Ni - 80\%Mo + 0,35(t - 8) \quad (8.7)$$

Majta et al.¹¹⁹ desenvolveram a equação (8.8) para um aço baixo C e Mn, com 0,028% de Nb, deformado abaixo de T_{nr} e resfriado a várias taxas.

$$Ar_3 = 830 - 19TR^{0,481} - 0,5 \exp \left[\frac{0,042d\gamma + 7,8}{(2,11 + \varepsilon_c)^{1,35}} \right] \quad (8.8)$$

Nakata e Militzer¹¹² estudaram um aço baixo C alto Mn microligado ao Ti e Nb e expressaram Ar_3 pela equação (8.9), onde ε_c é a deformação da austenita.

$$Ar_3 = Ae_3 - 38,3TR^{0,11} (d\gamma)^{0,37} \exp(-0,37\varepsilon_c) \quad (8.9)$$

Para aços de baixa liga em geral, Miettinen⁶⁵ compilou uma série de dados de diagramas CCT e obteve, por regressão estatística, a equação (8.10). Além da expressão para Ar_3 , este autor obteve também equações para as temperaturas de término de formação de ferrita, além de início e de final de formação da perlita. A é o tamanho de grão austenítico, citado anteriormente.

$$Ar_3 = 892,15 - 523,35\%C + 86,5\%Si - 65,88\%Mn + 405,05(\%C)^2 - 180,54(\%C\%Si) - 3,65(\%C\%Mn) + 2,4A - 5,18TR^{0,5} - 6,78\ln(TR) \quad (8.10)$$

Yuan et al.¹⁸³ obtiveram a equação (8.11) para previsão da Ar_3 em aços CMn microligados ao Nb através de resultados obtidos em ensaios dilatométricos. É interessante nesta equação o termo referente ao efeito da deformação da austenita abaixo da T_{nr} , que inclui a deformação da austenita, ε_c , e o tempo para início de precipitação, $t_{0,05}$. No trabalho desses autores estes termos foram calculados por

equações de literatura. Ainda nesta equação, os valores da concentração de Nb, [Nb], são dados como porcentagem em massa.

$$Ar_3 = 830 + 3700 \exp\left(-\frac{d\gamma}{6,7}\right) - 198TR^{0,1} - 6646[Nb] - 2327[Nb]^2 + 66\left(\frac{1}{t_{0,05}} + \varepsilon_c\right) \quad (8.11)$$

As equações de (8.4) a (8.10) foram aplicadas às condições dos ensaios para o aço I-47Nb no cálculo de Ar_3 e os resultados são mostrados na Tabela 8.3.

Tabela 8.3 - Valores de Ar_3 calculados por equações de literatura para as condições de ensaio com o aço I-47Nb, comparados aos valores medidos.

ε_1 (mm/mm)	ε_2 (mm/mm)	TR (°C/s)	d γ (μ m)	Ar_3 me- dida (°C)	Ar_3 calculada (°C)						
					Choo	Santos	Blas	Ouchi	Majta	Nakata	Miettinen
0,01	0,22	5	59	691	746	727	711	754	775	631	723
0,01	0,50	5	59	717	746	727	711	754	780	650	723
0,25	0,01	5	48	670	746	729	711	754	771	631	725
0,25	0,22	0,5	48	741	762	757	715	754	805	685	748
0,25	0,22	2	48	729	755	740	713	754	792	662	735
0,25	0,22	5	48	709	746	729	711	754	777	645	725
0,25	0,22	7,3	48	701	742	724	708	754	769	638	720
0,25	0,22	7,8	48	693	741	723	708	754	767	637	719
0,25	0,22	10	48	687	737	720	706	754	761	631	715
0,25	0,22	24	48	676	720	709	693	754	731	612	700
0,25	0,36	2	48	741	755	740	713	754	794	670	735
0,25	0,36	5	48	717	746	729	711	754	780	654	725
0,25	0,36	8,6	48	709	739	722	707	754	767	644	718
0,25	0,36	10	48	699	737	720	706	754	763	641	715
0,25	0,36	20	48	691	724	711	697	754	741	627	704
0,25	0,36	24	48	688	720	709	693	754	733	623	700
0,36	0,22	5	40	710	746	731	711	754	778	657	726

Os valores calculados pelas equações de Choo¹⁶¹ e de Santos et al.¹⁵ são superiores aos medidos, em geral e, portanto, tais equações não se aplicam ao cálculo de Ar_3 nos aços estudados. Isto é justificado uma vez que os aços CMn, empregados para seu desenvolvimento, possuíam temperaturas mais altas de transformação, devido, principalmente, ao teor mais baixo de Mn e à inexistência de Nb.

Os resultados fornecidos pela equação de Blas¹⁸⁴ foram bastante próximos dos medidos neste trabalho, entretanto tal equação possui a limitação de não considerar o efeito da deformação da austenita antes da transformação.

A equação de Ouchi¹⁰⁴ foi obtida para a condição de resfriamento ao ar, onde as taxas são inferiores a 1°C/s, não devendo ser aplicada para condições de resfriamento forçado. Como observado na Tabela 8.3 seria realmente esperado que as temperaturas calculadas por essa equação superestimasse os valores medidos.

A equação de Majta et al.¹⁶⁹ foi proposta para um aço CMn microligado ao Nb e V, cuja composição química foi bastante próxima à dos aços aqui estudados. Não foi encontrada, entretanto, uma justificativa para que os valores previstos de Ar₃, nesse caso, tivessem sido significativamente acima dos medidos.

A equação de Nakata¹¹² foi desenvolvida para um aço CMn microligado ao Nb e Ti, porém os teores destes últimos elementos foram superiores aos dos aços estudados aqui, o que pode justificar o fato de esta equação ter subestimado os valores medidos de Ar₃.

Finalmente a equação de Miettinen⁶⁵ não foi estabelecida especificamente para aços microligados ao Nb. Além disso, esta equação não contempla o efeito da deformação da austenita na transformação, o que a invalida para os aços em estudo.

Diante dessas ponderações e levando-se em conta as análises dos efeitos das variáveis em estudo em Ar₃, optou-se por ajustar os dados experimentais obtidos à uma equação por regressão múltipla, da forma mostrada em (8.12). Os dados usados neste ajuste são dados na Tabela 8.2. A análise foi conduzida no programa estatístico *Statgraphics Plus* 5.1.

$$Ar_3 = Ae_3 - a_0 TR^m (\epsilon_2)^n (\epsilon_1)^p \quad (8.12)$$

Na equação (8.12), Ae₃ é a temperatura de equilíbrio termodinâmico entre austenita e ferrita, para o aço em questão; a₀, m, n e p são constantes ajustadas. O valor de Ae₃, 822°C para o aço I-47Nb, foi obtido pelos cálculos termodinâmicos citados no Capítulo 4.

A equação obtida é dada pela expressão (8.13), cujo coeficiente de determinação r² foi de 0,93. Observa-se que a aproximação dos resultados experimentais aos valores medidos foi satisfatória, considerando-se o valor de r² e esta aproximação. A Figura

8.12 mostra o gráfico comparativo entre valores medidos e calculados pela expressão (8.13) para o aço I-47Nb.

$$Ar_3 = 822 - 69,805TR^{0,1712}(\varepsilon_2)^{-0,1054}(\varepsilon_1)^{-0,0291} \quad (8.13)$$

Por ser uma equação estatística, e não derivada de princípios físicos, a equação (8.13) fica estritamente válida dentro das condições de seu ajuste, que foram: taxa de resfriamento entre 0,5 e 24°C/s; deformação acima de T_{nr} entre 0 e 0,36 e deformação abaixo de T_{nr} entre 0 e 0,36. Entretanto, mesmo para uma deformação ε_2 de 0,50, o erro no cálculo de Ar_3 foi de 9°C, Tabela 8.3. Considerando-se todas as condições experimentais, o erro máximo foi de 10°C, que fica plenamente dentro da expectativa de acerto para um modelo de transformação de fases e também dentro da faixa de erro experimental. Os valores calculados com a equação (8.13) são dados na coluna “Modelo” da Tabela 8.3.

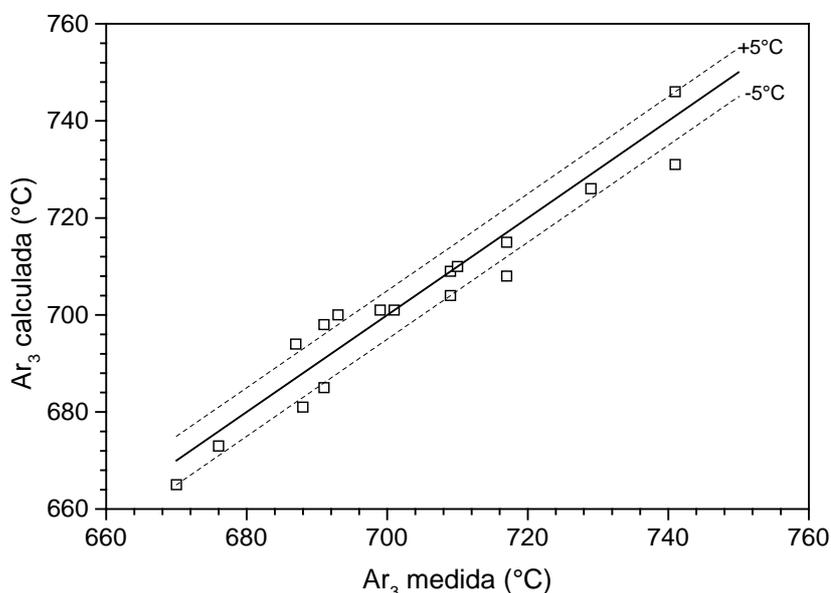


Figura 8.12 - Gráfico comparativo entre valores medidos e calculados de Ar_3 com a equação desenvolvida.

A equação (8.13) é atraente do ponto de vista prático pela sua simplicidade. Embora alguns pesquisadores^{22,106} tenham procurado desenvolver equações fundamentais para

prever a A_{r3} , buscando com isso generalizar os resultados, as expressões obtidas não têm, em geral, mostrado maior precisão do que aquela obtida pela equação (8.13). Portanto, do ponto de vista da aplicação industrial, esta equação se torna preferível.

Vale ainda fazer um comentário sobre a aplicação da equação (8.13) às condições típicas do resfriamento de chapas grossas no processo industrial, comparativamente à previsão da A_{r3} pela equação de Ouchi¹⁰⁴, que tem tido ampla aplicação nos processos industriais. Medidas de taxas de resfriamento em condições industriais na Usiminas em chapas de 12,5 mm de espessura forneceram valores em torno de 0,3°C/s. A deformação ε_1 na equação (8.13) corresponde àquela do último passe com recristalização completa da austenita, a qual na laminação de chapas grossas é cerca de 0,20. A deformação acumulada na laminação controlada, abaixo da T_{nr} , varia entre aproximadamente 1 e 1,8. Aplicando-se estes valores à equação (8.13), obtém-se os resultados de A_{r3} mostrados na Figura 8.13. Foi incluído nesta figura o valor de 754°C, obtido pela equação de Ouchi para o aço I-47Nb e espessura de 12,5 mm. Na deformação em torno de 0,3 o resultado do cálculo da equação (8.13) iguala ao obtido pela equação de Ouchi. Na deformação máxima de 1,8, o valor da equação (8.13) ultrapassa o calculado por Ouchi em 12°C.

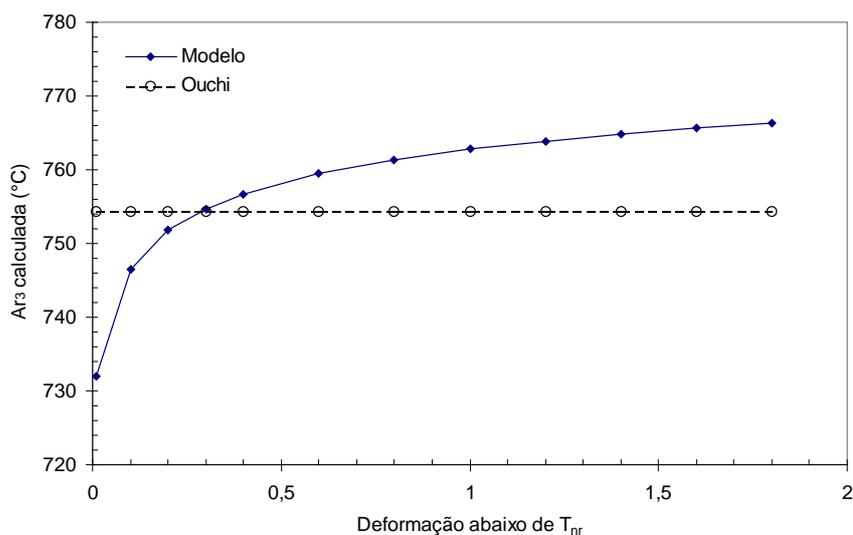


Figura 8.13 - Comparação entre valores calculados de A_{r3} pela equação desenvolvida e pela equação de Ouchi, para condições típicas de laminação de chapas grossas.

Esses fatos indicam uma razoável capacidade de previsão da equação (8.13) mesmo quando extrapolada do domínio de obtenção. Por outro lado, mostra-se também neste caso que diferenças maiores ocorreriam em deformações menores que 0,3, sugerindo, como se deveria esperar da discussão acima, que as previsões advindas do uso da equação de Ouchi podem ser casos particulares de uma situação mais geral, como a prevista pela equação proposta neste trabalho.

Se forem utilizados os valores de tamanhos de grão austenítico recristalizados, $d\gamma$, Tabela 8.2, ao invés da deformação ε_1 , obtém-se, também, um ajuste satisfatório de equação na previsão da Ar_3 . A equação obtida é dada em (8.14), como alternativa à (8.13), caso os modelos desenvolvidos venham a ser acoplados a modelos de previsão de evolução de tamanho de grão. O coeficiente de determinação, neste caso $r^2=0,91$, foi ligeiramente menor que no caso do ajuste com ε_1 , $r^2=0,93$.

$$Ar_3 = 822 - 22,2405TR^{0,1677} (\varepsilon_2)^{-0,1027} (d\gamma)^{0,3103} \quad (8.14)$$

8.5. Previsão da Ar_3 Para os Aços Fabricados em Escala Piloto

A equação (8.13) foi aplicada às condições dos ensaios realizados com os aços produzidos em escala piloto uma vez que havia sido concluído que, em geral, não havia efeito significativo do teor de Nb nem da rota de produção sobre a Ar_3 . Na Tabela 8.4 são mostrados os resultados medidos de Ar_3 para esses aços, juntamente com os seus valores calculados com a aplicação da equação (8.13).

Nota-se uma razoável aproximação entre esses valores, sendo a diferença máxima de 11°C quando a taxa de resfriamento foi cerca de 20°C/s. Evidentemente que esta diferença era esperada, tendo em vista os resultados da Figura 8.1, e pelo fato de que o modelo foi ajustado somente com dados do aço I-47Nb. Havendo realmente uma causa que explique os menores valores de Ar_3 dos aços produzidos em escala piloto quando resfriados em taxas elevadas, poderia ser feita uma correção na equação (8.13) para tais aços. No entanto, dado que as perspectivas de aplicações dos resultados deste estudo são para aços processados industrialmente, uma correção dessa natureza não teria relevância tecnológica.

Tabela 8.4 - Temperaturas de início de transformação medidas e calculadas para os aços processados em escala piloto.

Aço	ε_1	ε_2	TR (°C/s)	Ar ₃ medida (°C)	Ar ₃ calculada (°C)
P-27Nb	0,25	0,22	2	733	726
	0,25	0,22	5	719	709
	0,25	0,22	10	697	694
	0,25	0,22	20	661	678
	0,25	0,36	2	739	731
	0,25	0,36	5	718	715
	0,25	0,36	10	704	701
	0,25	0,36	20	674	685
	0,36	0,22	5	713	710
P-48Nb	0,25	0,22	2	729	726
	0,25	0,22	5	717	709
	0,25	0,22	10	690	694
	0,25	0,36	5	719	715
	0,25	0,36	10	703	701
	0,25	0,36	20	674	685
	0,36	0,22	5	720	710
P-68Nb	0,25	0,22	2	724	726
	0,25	0,22	5	713	709
	0,25	0,22	10	691	694
	0,25	0,36	5	717	715
	0,25	0,36	10	693	701
	0,25	0,36	19	678	686
	0,36	0,22	5	715	710

Gráficos comparativos entre as temperaturas medidas e as calculadas são mostrados na Figura 8.14. Para os aços P-48Nb e P-68Nb existe uma ligeira tendência da equação (8.13) superestimar o cálculo em níveis mais altos de Ar₃ e de subestimar em níveis mais baixos. Ainda assim, os desvios entre cálculos e medições, como já comentado, não são significativos.

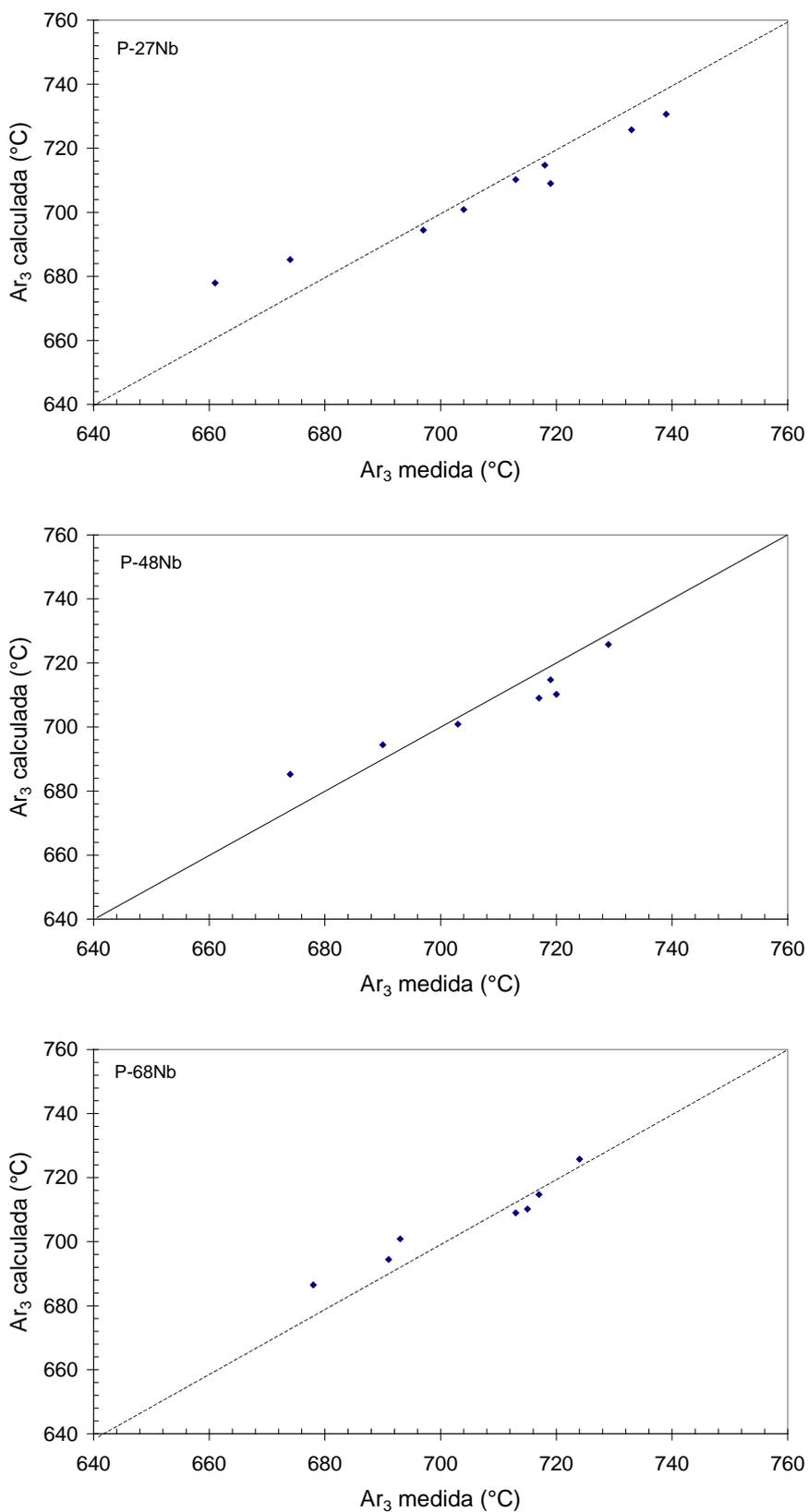


Figura 8.14 - Comparações entre Ar₃ calculadas e medidas para os aços processados em escala piloto.

8.6. Resumo

Foram mostradas nesse capítulo as influências das variáveis de processamento, isto é, taxa de resfriamento e deformações acima e abaixo da temperatura de não-recristalização, em um aço microligado ao Nb-V-Ti, na temperatura de início de transformação, A_{r3} . Também foi avaliado o efeito do teor de Nb neste aço, entre 0,027% e 0,068%. A taxa de resfriamento foi variada entre 0,5 e 24°C/s, e as deformações entre 0 e 0,36. Foi verificado que ocorre elevação da A_{r3} com as deformações aplicadas, e abaixamento da A_{r3} com o aumento da taxa. Essas conclusões possuem o respaldo na literatura e foram justificadas baseando-se no conceito de taxa de nucleação da ferrita. Finalmente, foi deduzida uma equação empírica para previsão da A_{r3} em função das variáveis utilizadas. Obteve-se uma boa aproximação entre valores medidos e calculados, sendo o coeficiente de determinação de 0,93. Embora não tenha sido originada de conceitos fundamentais de nucleação, a equação aqui deduzida apresenta interesse prático pela sua simplicidade e boa precisão.

9. MICROESTRUTURAS FORMADAS

Neste capítulo são mostradas as microestruturas formadas, observadas por microscopia ótica, em parte dos corpos-de-prova ensaiados. As microestruturas apresentadas foram selecionadas e organizadas visando-se mostrar o efeito das variáveis de processo investigadas neste estudo. Adicionalmente, foram feitas análises quantitativas das fases formadas, com o propósito de validar os modelos de previsão, discutidos no capítulo 10.

Na Figura 9.1 é mostrada, como exemplo, a microestrutura obtida em um dos ensaios realizados. Verificou-se que a microestrutura foi constituída de ferrita aproximadamente poligonal (FP), ou alotriomórfica, grãos aciculares do tipo ferrita de Widmanstätten e ferrita bainítica (FW, FB), perlita (P), além de pequenas quantidades de constituinte martensita-austenita (MA). A proporção e morfologia desses constituintes variaram em função da condição de ensaio. No entanto, a correta identificação dos constituintes aciculares depende do uso de técnicas avançadas de microscopia eletrônica de transmissão, o que está fora do escopo deste estudo.

Assim, no contexto deste trabalho, nas análises quantitativas foram consideradas apenas a ferrita e a perlita, como discutido a seguir. Uma análise quantitativa do constituinte MA mostrou que sua fração volumétrica foi sempre menor que 3%, portanto, abaixo da dispersão das medidas experimentais.

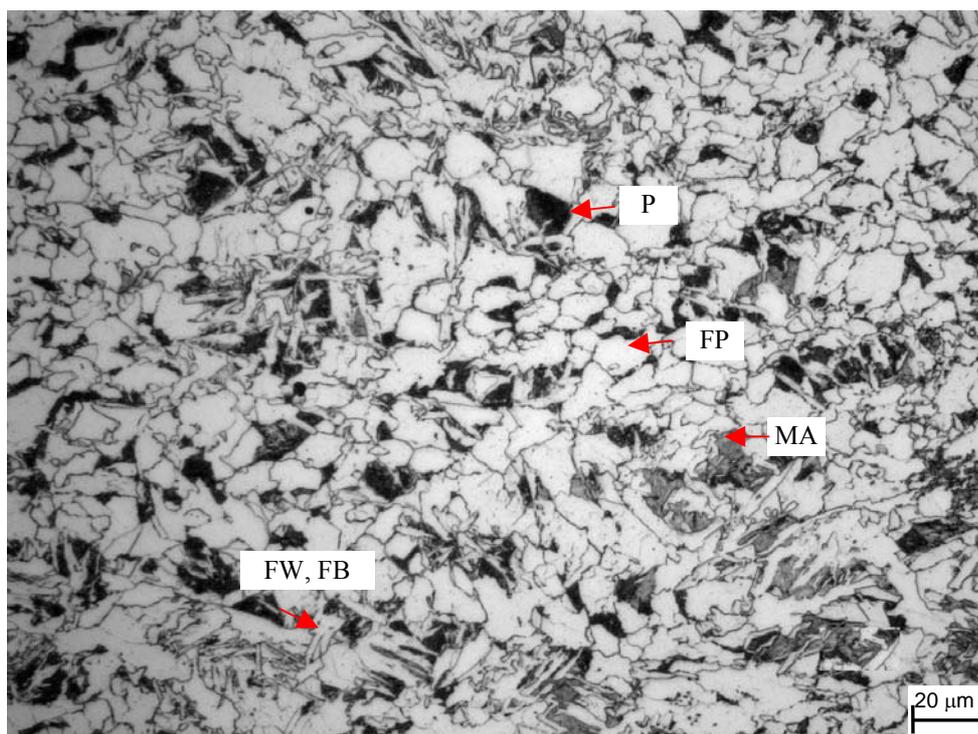


Figura 9.1 - Microestrutura obtida após ensaio do aço I-47Nb, na condição base com $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$.

9.1. Efeito da Deformação ε_1

Na Figura 9.2 são mostradas as microestruturas formadas em ensaios com o aço I-47Nb, nos quais foi variada a deformação ε_1 , e aplicando-se ou não a simulação do bobinamento. É nítida a influência dessa deformação, aumentando a quantidade de ferrita poligonal e refinando a microestrutura. Essa influência é explicada pelo refino do grão, por recristalização estática, causado pela deformação acima de T_{nr} . Quanto maior a deformação maior será a taxa de nucleação de ferrita nos contornos de grão da austenita, o que leva a um grão mais fino. Além disso, as temperaturas mais altas de transformação, discutidas no capítulo anterior, causadas pelo aumento da deformação favorece a formação de ferrita poligonal.

A quantidade de ferrita total (análise quantitativa considerando-se apenas ferrita e perlita no corpo-de-prova) apresentou discreto aumento, passando de 71,3% para 76,3% quando a deformação subiu de zero para 0,36, apesar de ter ocorrido significativo aumento da quantidade de ferrita poligonal.

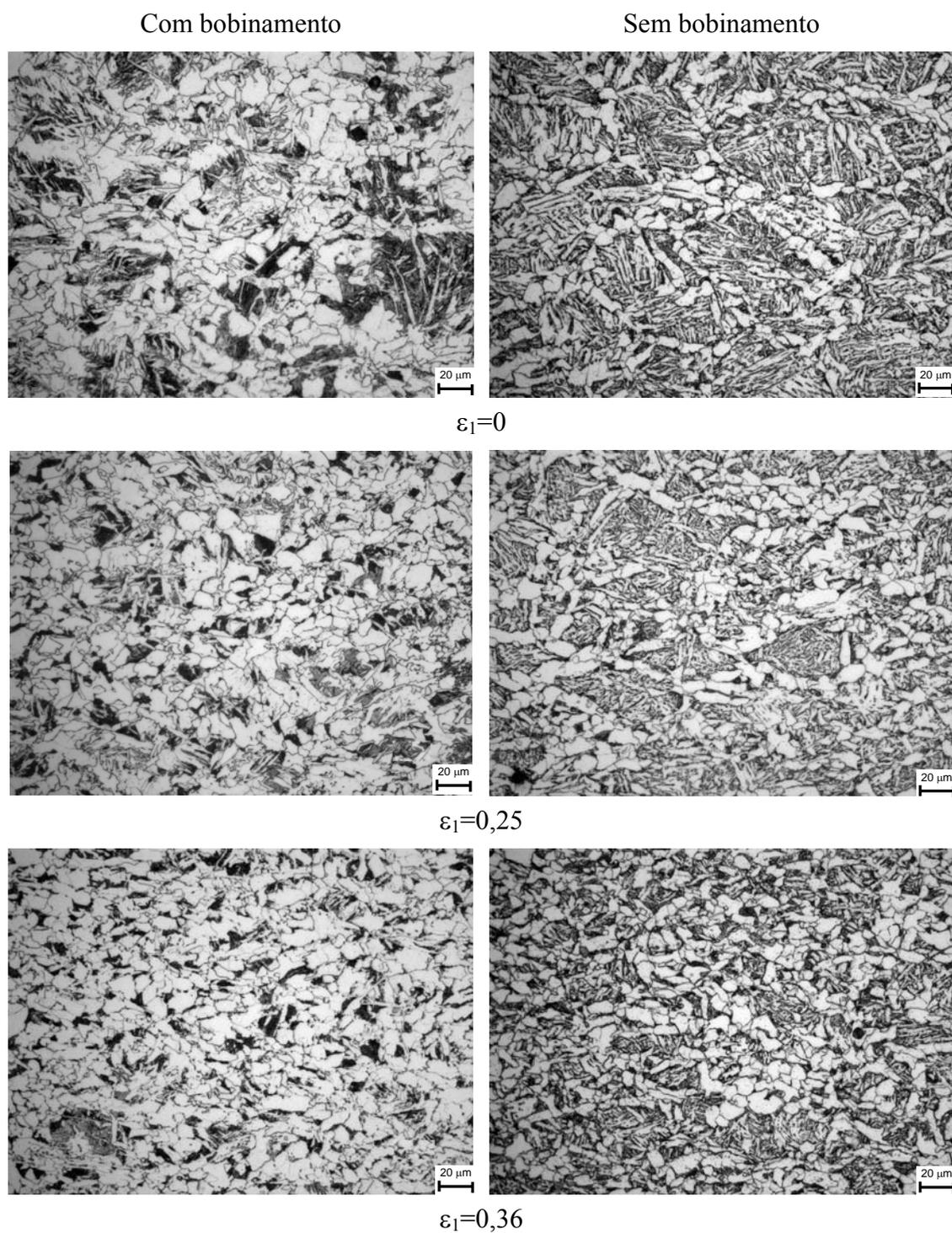


Figura 9.2 - Efeito da deformação ε_1 na microestrutura formada com e sem bobinamento. Aço I-47Nb, $\varepsilon_2=0,22$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$.

O efeito da deformação é percebido em ambas as condições, com e sem bobinamento. No último caso, porém, a quantidade de constituintes de baixa temperatura (aciculares) é maior, em detrimento da formação de perlita e ferrita poligonal, formados por mecanismos difusionais a em temperaturas mais altas. Este primeiro conjunto de microestruturas já indica o efeito marcante do bobinamento na microestrutura do aço.

9.2. Efeito da Deformação ϵ_2

Doravante não serão mais apresentadas as microestruturas obtidas em ensaios na condição simulada sem bobinamento, por já estar suficientemente claro que esta situação se distancia do interesse prático, fugindo ao foco do presente estudo. O comentário feito no item anterior com relação à comparação das microestruturas com e sem bobinamento continua, em geral, válido para as demais condições de ensaios.

Como esperado, com o aumento da deformação ϵ_2 houve maior formação de ferrita poligonal. Este resultado está de acordo com resultados publicados em literatura^{38,107-108,111} e é explicado pela estabilização do campo da ferrita no diagrama CCT pelo encruamento da austenita previamente à transformação. Na figura 9.3 são mostradas as microestruturas do aço I-47Nb ensaiado na condição base, mas variando-se ϵ_2 entre 0 e 0,36. A fração de ferrita total aumentou de 0,64 para 0,77 com essa deformação. Quando considerada apenas a ferrita poligonal, esta fração variou de 0,53 para 0,73.

Vale ressaltar que a análise dos efeitos das variáveis de processo na transformação foi realizada para todos os aços estudados, e a mesma tendência foi observada. Todavia, para não ficar repetitivo e ainda considerando-se que o aço industrial é mais importante do ponto de vista prático, somente suas microestruturas serão apresentadas.

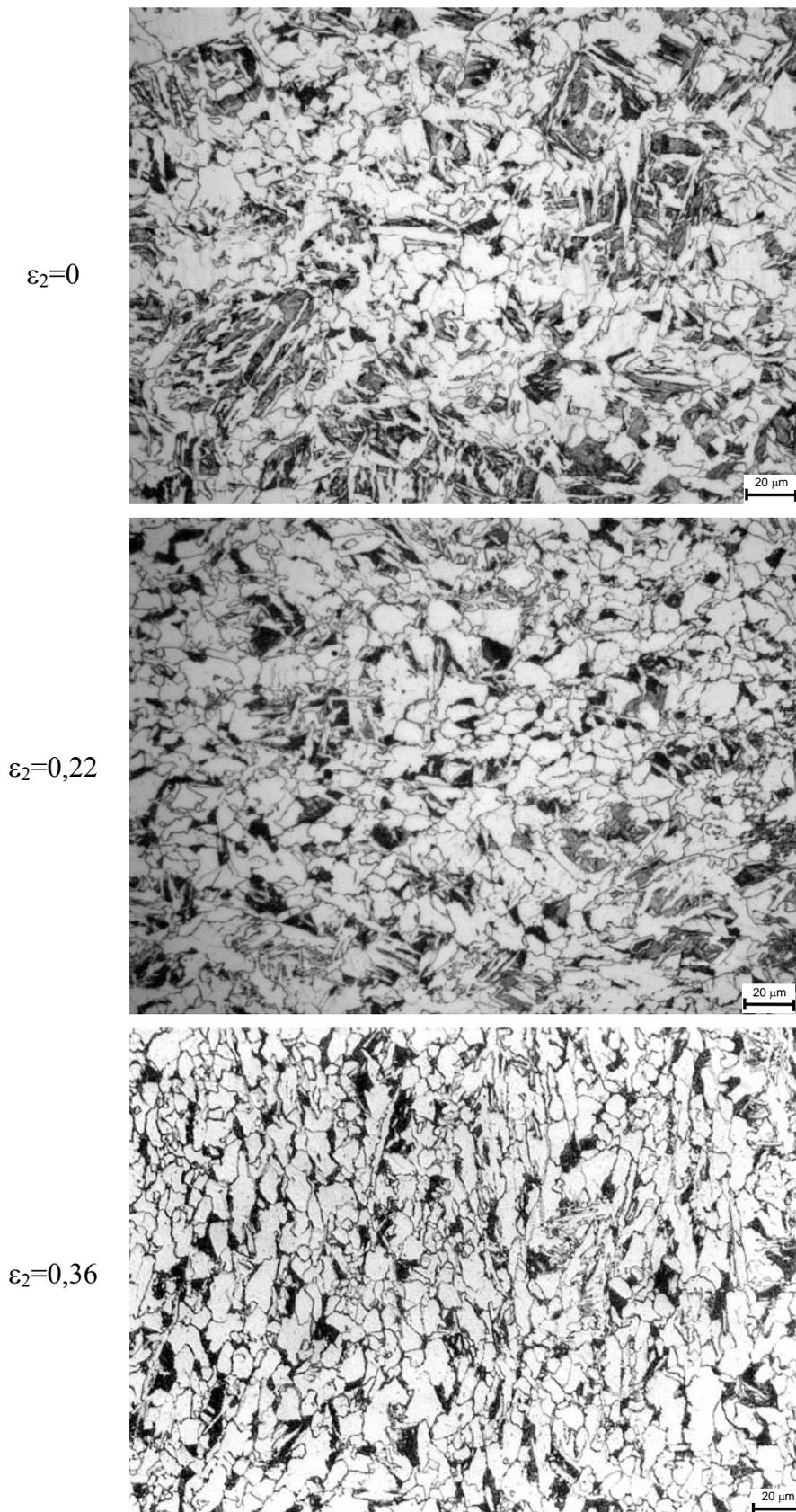


Figura 9.3 - Efeito da deformação ε_2 na microestrutura formada com bobinamento. Aço I-47Nb, $\varepsilon_1=0,25$; TR = 5°C/s e $T_b = 600^\circ\text{C}$.

9.3. Efeito da Taxa de Resfriamento

Na condição base de ensaio, $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e $T_b = 600^\circ\text{C}$, com o aço I-47Nb, foram utilizadas taxas de resfriamento de 0,5, 2, 5 e 10°C/s . Nas duas primeiras taxas, a microestrutura final foi constituída de ferrita poligonal e perlita somente, sendo em ambas as condições bastante similares. Então, na Figura 9.4 são mostradas as microestruturas obtidas com resfriamento a 2, 5 e 10°C/s . Evidentemente, a taxa de resfriamento exerce marcante influência na transformação e, assim, na microestrutura final. O efeito mais evidente é o aumento da quantidade de produtos aciculares com o aumento de TR. Além disso, os grãos de ferrita tornam-se mais finos e com contornos irregulares, do tipo serrilhados. Nota-se também a presença de considerável quantidade de pequenos grãos ferríticos entre grãos maiores. Percebe-se ainda que a quantidade de perlita, embora ainda presente em todas as condições, diminui com taxas crescentes de resfriamento.

Essas observações podem ser explicadas pelo deslocamento do início de transformação para temperaturas mais baixas, com o aumento de TR, como mostra a Tabela 9.1. Na taxa de 2°C/s , a fração transformada até o bobinamento, ΔX_A , foi de 0,77, enquanto que para TR de 10°C/s , esta fração foi de 0,37. Observa-se que a temperatura de final de transformação, A_{r_f} , praticamente não é afetada, ficando muito próxima da temperatura de final de resfriamento lento, 580°C . Com isso, a transformação ocorre inteiramente no intervalo entre A_{r_3} e o final do bobinamento. Deve-se frisar que: (i) a transformação da austenita a taxa de 2°C/s produziu ferrita poligonal e perlita apenas; (ii) o aumento da taxa resultou em aumento da quantidade de ferrita acicular; (iii) até o início do bobinamento formou-se ferrita poligonal apenas; (iv) o restante da transformação ocorreu entre aproximadamente 600°C e 580°C . Destas afirmações, conclui-se que os constituintes aciculares nos aços estudados são formados ou não na faixa de temperatura $600^\circ\text{C} \sim 580^\circ\text{C}$, dependendo da A_{r_3} . Isto é, à medida que a A_{r_3} se eleva, a fração transformada até o bobinamento aumenta e a quantidade de ferrita acicular formada nesta faixa de temperatura diminui, até, eventualmente, cessar.

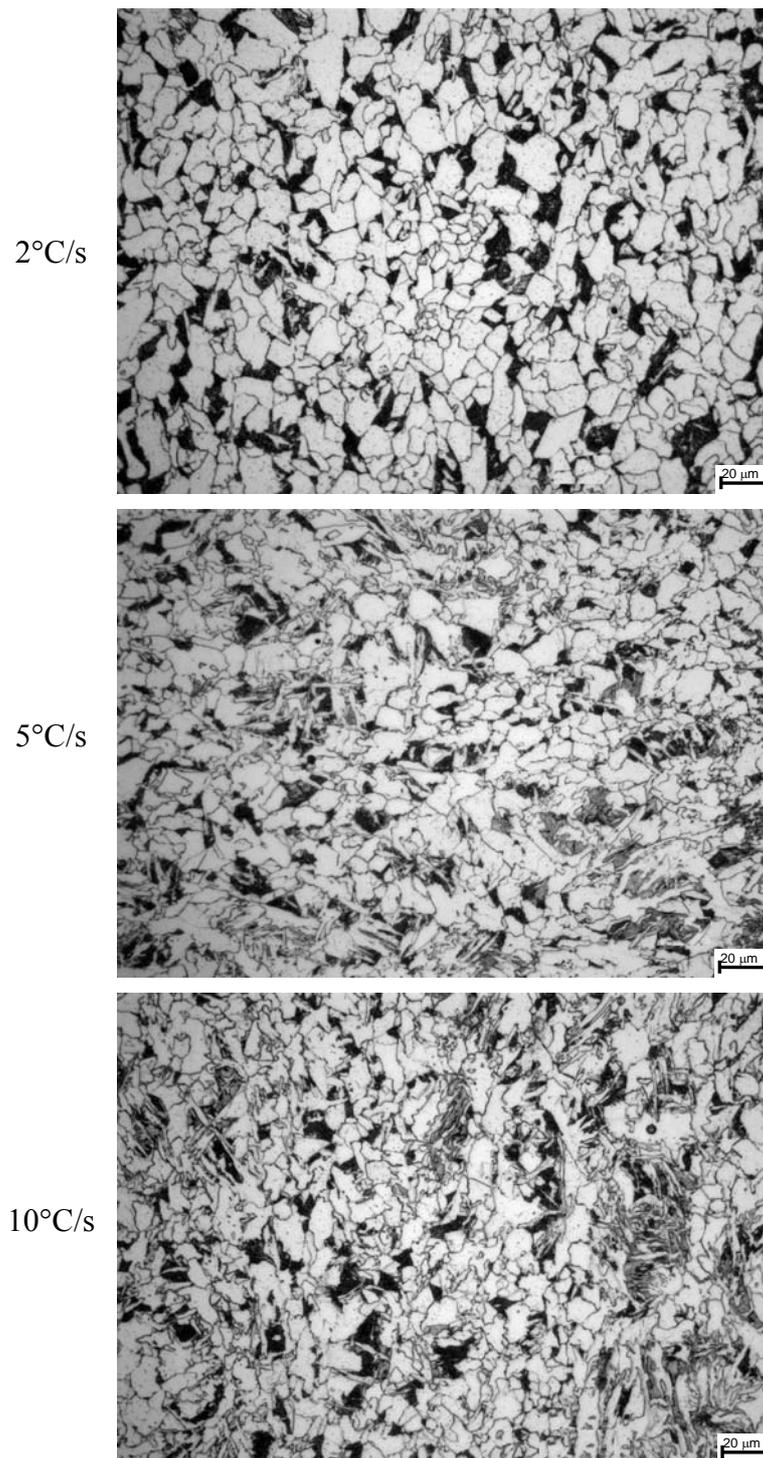


Figura 9.4 - Efeito da taxa de resfriamento na microestrutura formada. Aço I-47Nb, $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e $T_b = 600^{\circ}\text{C}$.

Tabela 9.1 - Efeito da taxa de resfriamento na transformação da austenita e na fração de ferrita total do aço I-47Nb.

TR (°C/s)	Ar ₃ (°C)	Ar _f (°C)	ΔXA	XF _t
0,5	741	590	0,98	0,78
2	735	587	0,77	0,81
5	705	579	0,46	0,73
10	688	577	0,37	0,65

O aumento de TR de 2 para 10°C/s causou redução da fração de ferrita total, XF_t, de 0,81 para 0,65, tabela 9.1. Em condição de resfriamento lento o suficiente para a transformação transcorrer em equilíbrio termodinâmico pleno (ortoequilíbrio), a fração de ferrita, calculada pela regra da alavanca, seria de 0,86. Para este cálculo, foi usado o teor de C de 0,66% na austenita, na temperatura eutetóide, obtido pelos cálculos termodinâmicos. Nas análises realizadas, mesmo com taxa de 0,5°C/s a fração de ferrita ainda foi menor que 0,86. Assim, mesmo em taxas tão baixas, o equilíbrio pleno não é atingido, e, ao contrário, a temperatura Ar₃ é significativamente menor que a Ae₃, 822°C, o que corrobora a ausência de equilíbrio pleno. Na literatura^{19,20} encontram-se evidências de que mesmo a taxas tão baixas quanto 0,1°C/s a transformação da austenita ocorre fora do equilíbrio.

9.4. Efeito da Temperatura de Bobinamento

A redução da temperatura de bobinamento apresentou um efeito similar ao do aumento da taxa de resfriamento, ou seja, maior formação de constituintes aciculares, maior refinamento da microestrutura em geral e menor quantidade de ferrita, além de tendência de contornos de grão ferríticos serrilhados. Esta similaridade é justificada pelo fato de que a atuação das duas variáveis, no sentido citado, produz o mesmo resultado de propiciar maior extensão da transformação em temperaturas mais baixas. Na Figura 9.5 são mostradas as microestruturas obtidas com o aço I-47Nb, ensaiado na condição base, e T_b variando entre 650 e 550°C, onde pode-se observar qualitativamente o efeito desta variável.

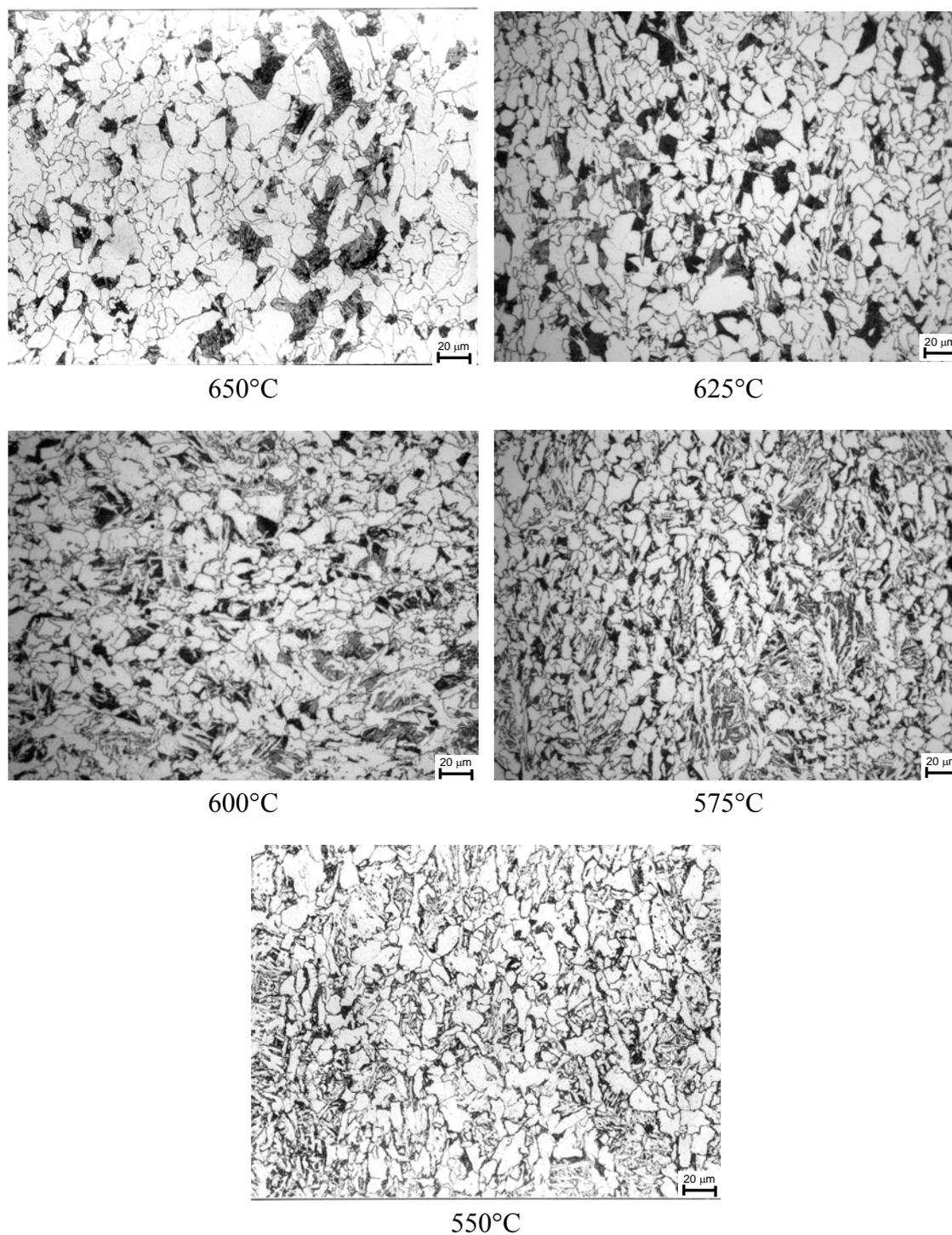


Figura 9.5 - Efeito da temperatura de bobinação na microestrutura do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$.

Para complementar as informações sobre a Figura 9.5, são mostradas na Tabela 9.2 as temperaturas de início e de final de transformação, as frações de ferrita total e poligonal e a fração transformada até T_b , em função desta temperatura. Para o bobinação a

650°C, toda a ferrita aparece na forma aproximadamente poligonal, de forma que $XF_p \approx XF_t$. À medida que T_b é abaixada ambas as frações de ferrita diminuem, porém de forma mais acentuada para a poligonal. Assim, a quantidade de ferrita acicular formada aumenta com a redução da temperatura de bobinamento. Evidentemente que a temperatura de final de transformação é menor para bobinamento em temperatura mais baixas. Observa-se que a transformação é completada dentro do tempo de resfriamento lento (20°C abaixo de T_b), excetuando-se para o bobinamento a 650°C.

Tabela 9.2 - Efeito da temperatura de bobinamento na transformação do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$.

T_b (°C)	Ar_3 (°C)	Ar_f (°C)	ΔXA	XF_t	XF_p
650	707	618	0,21	0,77	0,76
625	707	589	0,31	0,76	0,72
600	705	579	0,52	0,73	0,59
575	703	565	0,65	0,70	0,50
550	708	541	0,82	0,54	0,44

A análise quantitativa de fases por análise de imagem, considerando somente ferrita e perlita na microestrutura, forneceu baixas frações de ferrita total, especialmente a 550°C. Observando-se qualitativamente a microestrutura obtida no ensaio com baixa T_b , não parece verdadeiro que frações de perlita altas, se aproximando de 45%, estejam presentes. Portanto, é possível que exista também alguma bainita nesta microestrutura.

O efeito da temperatura de bobinamento foi analisado para as outras combinações de deformação ε_2 (0,22 e 0,36) e TR (5 e 10°C/s) para o aço I-47Nb e, em algumas situações, para os demais aços investigados. As tendências gerais apontadas dos efeitos dessas variáveis foram observadas em todas combinações.

A título de ilustração são mostradas na Figura 9.6 as microestruturas para a combinação ($\varepsilon_2 = 0,36$ e $TR = 10^\circ\text{C/s}$) para o aço I-47Nb, para T_b em três níveis. Para melhor interpretação dessas microestruturas são apresentados na Tabela 9.3 os resultados de faixa de temperatura de transformação e fração formada de ferrita, exceto para a $T_b=600^\circ\text{C}$, por não ter sido feita a análise quantitativa deste corpo-de-prova.

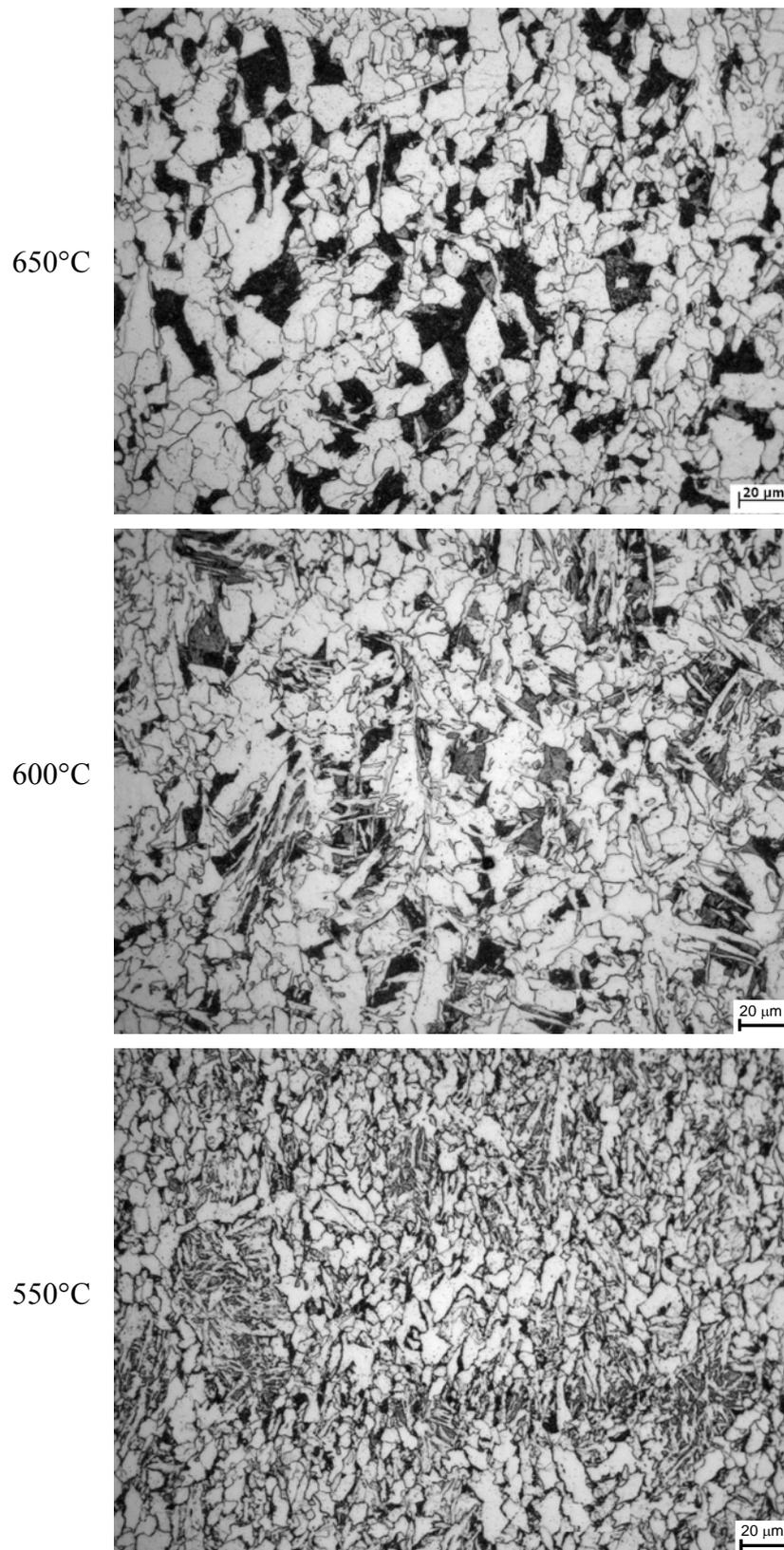


Figura 9.6 - Efeito da temperatura de bobinamento na microestrutura formada do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\epsilon_1=0,25$; $\epsilon_2=0,36$ e $TR = 10^\circ\text{C/s}$.

Nesta situação, dois efeitos estão atuando em sentido oposto: deformação e taxa de resfriamento. Em relação à condição da Tabela 9.2 e Figura 9.5, a taxa foi duplicada e a deformação aumentada em 63%. Comparando-se, então, os resultados da Tabela 9.3 e Figura 9.6 com os da Tabela 9.2, nota-se que estes dois efeitos contrabalançaram quando o bobinamento foi a 650°C. No entanto, em temperaturas mais baixas, nota-se que o efeito do aumento da deformação suplantou discretamente o efeito da taxa, resultando em maior formação de ferrita, especialmente a poligonal.

Tabela 9.3 - Efeito da temperatura de bobinamento na transformação do aço I-47Nb, ensaiado na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,36$ e TR = 10°C/s.

T_b (°C)	Ar_3 (°C)	Ar_f (°C)	ΔXA	XF_t	XF_p
650	700	623	0,23	0,781	0,66
600	694	575	0,40	NR	0,64
550	704	545	0,82	0,723	0,55

9.5. Efeito da Rota de Processamento e do Teor de Nb do Aço

Vale ressaltar, novamente, que não é objetivo deste estudo uma análise detalhada da microestrutura formada o que, tendo em vista principalmente sua natureza complexa, requer recursos avançados de microscopia de transmissão. Dado que o principal objetivo foi o modelamento da transformação de fases, então, torna-se interessante fazer uma abordagem geral sobre as microestruturas formadas, tal como neste capítulo.

São mostradas na Figura 9.7 as microestruturas dos 4 aços estudados com deformação ε_2 de 0,22 e 0,36, sendo os corpos-de-prova resfriados até T_b com taxa de 10°C/s. Aparentemente, os aços processados em escala piloto apresentam microestrutura mais refinada que o processado industrialmente. Existe uma razão para isso pois, como mostrado no Capítulo 6, o tamanho de grão austenítico recristalizado deste último foi maior que dos demais. Foi comentado no Capítulo 9 que houve uma tendência de mais baixa temperatura de início de transformação do aço I-47Nb, o que foi atribuído ao seu maior grão austenítico. Portanto, parece bem justificada a diferença de refino da microestrutura final.

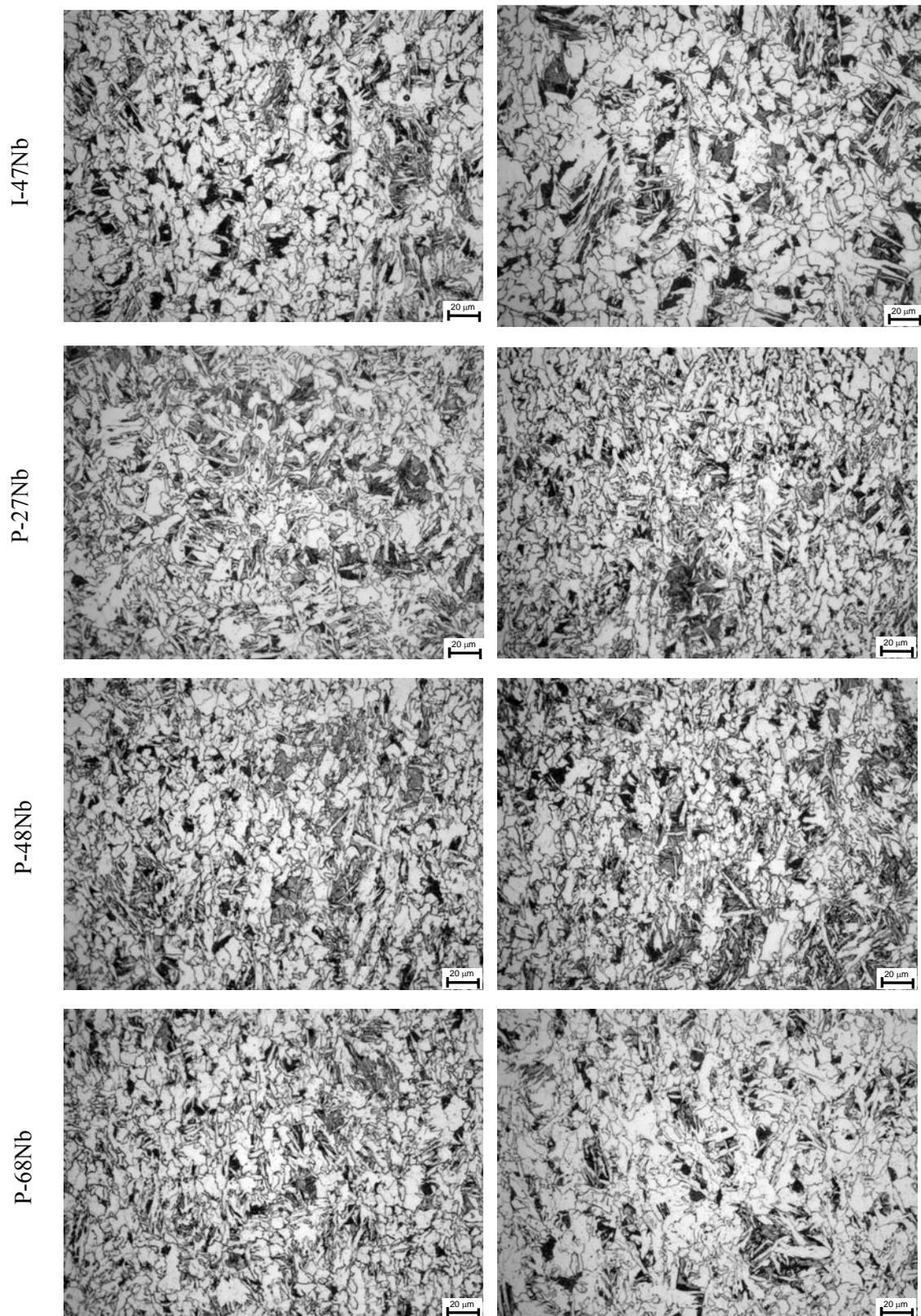


Figura 9.7 - Comparação entre as microestruturas formadas em corpos-de-prova ensaiados com $\epsilon_1=0,25$, $TR=10^\circ\text{C/s}$, $T_b=600^\circ\text{C}$, e deformação $\epsilon_2=0,22$ (à esquerda) e $\epsilon_2=0,36$ (à direita).

Por outro lado, qualitativamente, não são percebidas diferenças significativas entre a morfologia das fases/constituintes, as quais podem ser classificadas como: ferrita poligonal, perlita, ferrita acicular e agregados de segunda fase.

9.6. Resumo

Neste capítulo foram apresentadas as microestruturas obtidas nos ensaios dilatométricos na Gleeble. Concluiu-se que tais microestruturas foram constituídas de ferrita poligonal, ferrita acicular, perlita e ilhas de martensita. Quanto maior a deformação aplicada acima da temperatura de não-recristalização, menor o tamanho do grão austenítico recristalizado, o que favorece a formação de ferrita poligonal e o refino da microestrutura. O mesmo efeito é apresentado pela deformação de encruamento da austenita, aplicada abaixo da T_{nr} . O efeito da taxa de resfriamento é contrário ao das deformações, favorecendo a formação de constituinte acicular. Porém, se o condicionamento da austenita é intenso, o efeito da taxa tende a ser mascarado. Quanto mais baixa a temperatura de bobinamento, maior a quantidade de constituintes aciculares, pois uma fração substancial da transformação passa a ocorrer em baixas temperaturas. Quanto aos aços processados em escala piloto, não foi observado efeito significativo do teor de Nb na microestrutura formada, considerando-se a análise apenas por microscopia ótica. Comparando-se os aços processados em escala piloto com o processado industrialmente, a microestrutura deste último pareceu mais grosseira, o que pode ser atribuído ao maior tamanho de grão após encharque.

10. CINÉTICA DE TRANSFORMAÇÃO

Neste capítulo é tratada de forma quantitativa a evolução da transformação da austenita com a temperatura e com o tempo, nas fases formadas. São mostrados os efeitos das variáveis de processo na cinética de transformação, a qual foi modelada matematicamente por uma equação do tipo Avrami conjugada com a regra da aditividade. Para atingir o objetivo principal proposto neste trabalho, o modelamento da cinética de transformação, foram avaliados e descritos matematicamente o efeito das variáveis de processo nos parâmetros de ajuste do modelo matemático, de forma a generalizar a sua aplicação. Finalmente, é mostrada a previsão da seqüência de fases, com suas respectivas frações volumétricas, formadas pelo resfriamento do aço em dois regimes, um em alta taxa de resfriamento, e outro de baixa taxa, o que se aproxima das condições industriais de produção de tiras a quente.

10.1. Determinação das Curvas de Transformação

Foram mostrados no item 3.7 os métodos de obtenção da fração transformada da austenita, a partir de curvas dilatométricas. Os métodos de Kop et al.¹³⁴, Zhao et al.¹³⁵ e Choi¹³⁶ propõem um refinamento muito grande, em relação à regra da alavanca, nos cálculos da fração transformada, mas em contrapartida têm as desvantagens da elevada complexidade e da necessidade de conhecimento de vários parâmetros, cuja precisão afeta significativamente os resultados. O método de Kop et al.¹³⁴ foi adaptado pelo presente autor¹⁸⁵ para cálculo da fração transformada nos aços em estudo, todavia quando resfriados em taxas muito lentas, onde somente ferrita e perlita foram formadas. Foi mostrado que, durante a formação da ferrita, a fração transformada calculada pela regra da alavanca forneceu resultados mais próximos dos medidos por metalografia que o método de Kop et al.¹³⁴.

Diante dessas considerações, optou-se por adotar a regra da alavanca para cálculo da fração transformada da austenita (fração transformada total) nos ensaios realizados. Um argumento adicional a favor deste método é que as imprecisões de sua aplicação não são maiores que os erros nas avaliações metalográficas, conforme aponta Hanlon et al.¹⁵².

Exemplos de curvas de transformação (fração transformada X_A versus temperatura ou tempo) assim construídas são mostrados na Figura 10.1, correspondentes às curvas dilatométricas das Figuras 7.2 e 7.3. Foram dois ensaios com o aço I-47Nb, na condição base ($\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ\text{C/s}$), sendo que naquele mostrado na Figura 10.1-a, foi simulada a condição de bobinamento, com resfriamento rápido interrompido a 600°C , passando-se ao resfriamento lento a $0,05^\circ\text{C/s}$ durante 400 s, e seguido do resfriamento natural até a cerca de 300°C . As curvas da Figura 10.1-b correspondem ao ensaio sem bobinamento, ou seja, resfriamento direto a 5°C/s até cerca de 300°C . Por questão de clareza no entendimento, são mostrados no topo destas figuras as regiões das curvas de resfriamento e dilatométrica, correspondentes à transformação. Estão indicadas nesta figura as temperaturas Ar_3 e de final de transformação, Ar_f , além do tempo total para a transformação se completar, t_f .

Evidentemente, até a interrupção do resfriamento rápido, na temperatura T_b , as correspondentes curvas dilatométricas e de fração transformada são similares para as condições com e sem bobinamento, pois até este ponto o ciclo termomecânico aplicado ao corpo-de-prova foi similar. Até a temperatura de 600°C , no casos exemplos dos ensaios, a fração transformada da austenita foi cerca de 0,46. A transformação se completa durante o resfriamento lento entre 600°C e 580°C , no tempo total de 364 s. Por outro lado, na condição de resfriamento direto, a temperatura final de transformação é bem mais baixa, de 486°C , mas o tempo de transformação é muito menor, 46 s. Estes resultados ilustram o fato de a transformação da austenita ser dependente do tempo e da temperatura, sendo que o tempo necessário para a transformação é maior em temperaturas mais altas.

É interessante observar que não existe descontinuidade aparente na curva de transformação versus tempo no momento da mudança da taxa de resfriamento, Figura 10.1-(a). Isso indica que a taxa de transformação não é alterada, portanto, o mecanismo de formação da nova fase também não deve ter sido afetado.

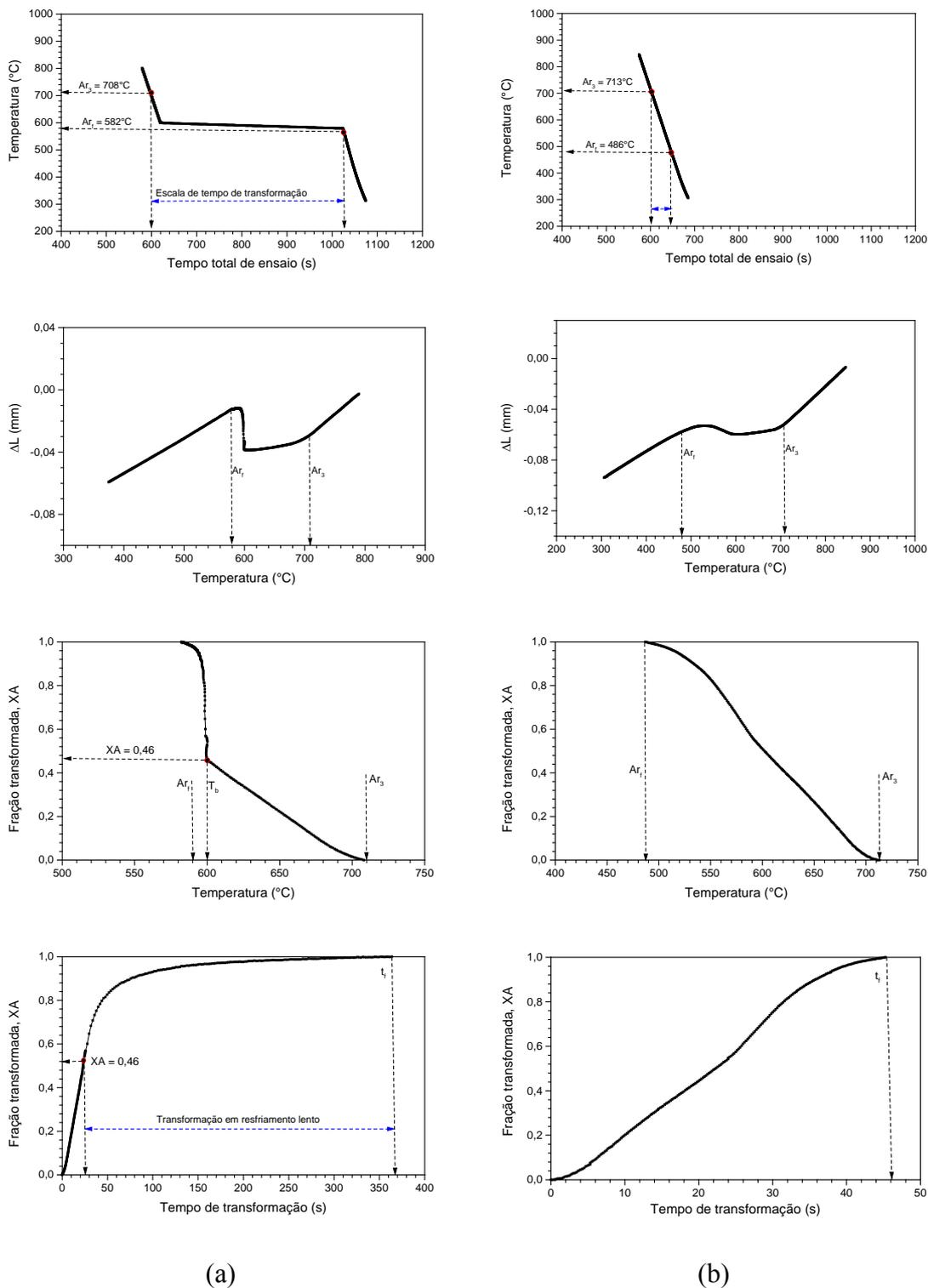


Figura 10.1 – Exemplos de curvas relativas aos resultados de ensaios e à cinética de transformação do aço I-47Nb resfriado a 5°C/s com bobinado em (a), e sem bobinado em (b).

10.2. Efeito das Variáveis de Processo na Cinética de Transformação

No presente item serão discutidos os efeitos nas curvas de transformação das seguintes variáveis: deformações ε_1 e ε_2 , taxa de resfriamento, temperatura T_b e aço estudado. A quantificação destes efeitos, através de parâmetros específicos visando o modelamento das curvas, é feita no item 10.3.

Para facilitar a interpretação das curvas de transformação, foram usados alguns parâmetros cuja definição leva em conta o conceito de cinética (velocidade da transformação) e a presença do bobinamento no processo de laminação de tiras a quente de aços. São os seguintes:

ΔXA : fração transformada até a temperatura de bobinamento;

Δt_f : tempo, a partir do bobinamento, necessário para completar a transformação (s);

t_f : tempo total de transformação (s);

ΔT_f : intervalo de temperaturas de transformação = $A_{r3} - A_{rf}$ ($^{\circ}C$);

ΔXA_b : fração transformada após o bobinamento = $1 - \Delta XA$;

TMT: taxa média de transformação após o bobinamento = $\Delta XA_b / \Delta t_f$ (s^{-1}).

Os dois primeiros parâmetros permitem quantificar de forma aproximada a cinética de transformação antes e após o bobinamento. Os dois seguintes foram usados para os ensaios na ausência de bobinamento e fornecem uma aproximação da cinética em termos globais. Os dois últimos parâmetros foram usados, especificamente, para avaliar o efeito da temperatura de bobinamento na cinética, uma vez que os dois primeiros parâmetros seriam inadequados para esse fim.

10.2.1. Efeito da deformação acima de T_{nr}

Na Figura 10.2 são mostradas as curvas de transformação do aço I-47Nb em função da temperatura e do tempo, para três valores de deformação aplicada acima de T_{nr} .

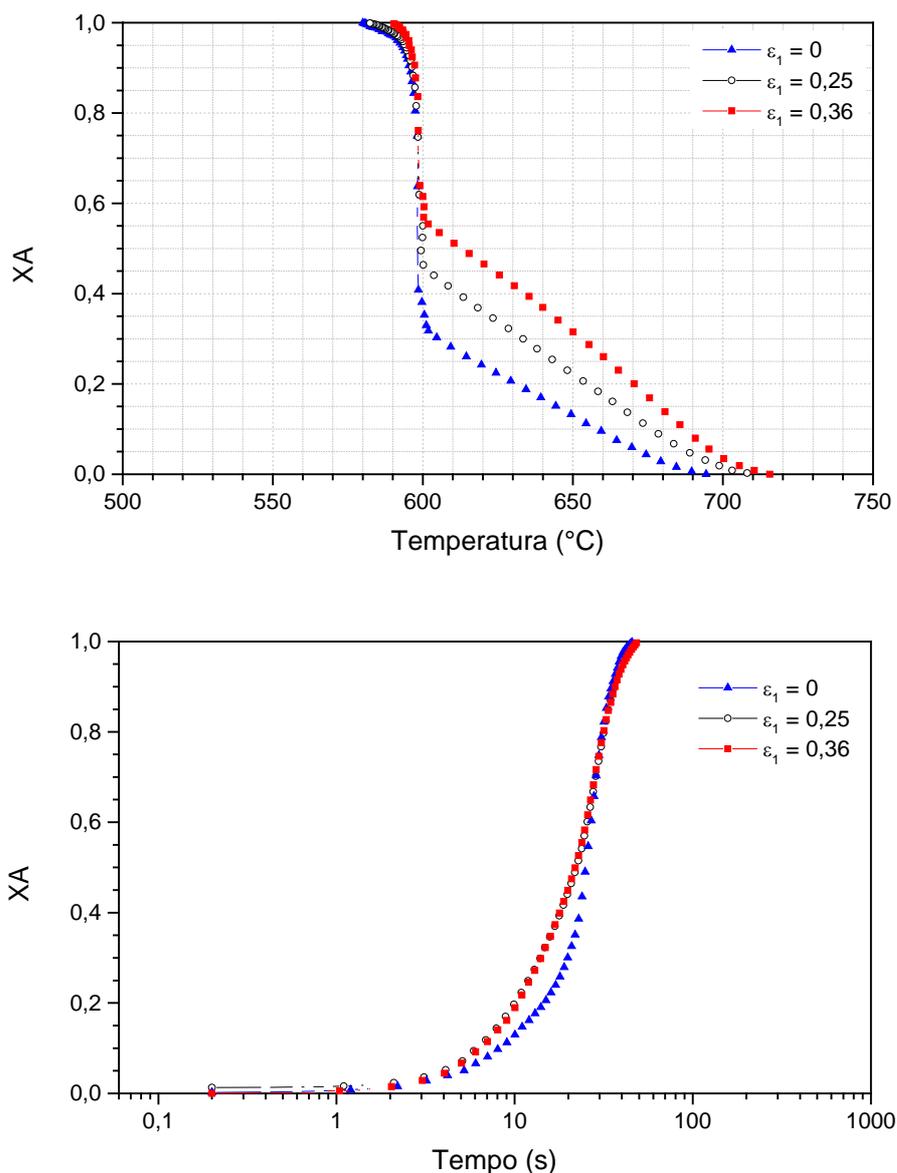


Figura 10.2 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para diferentes níveis de deformação acima de T_{nr} , na condição $\epsilon_2 = 0,22$, $TR = 5^\circ\text{C/s}$, $T_b = 600^\circ\text{C}$.

Um gráfico com os parâmetros fração transformada até o bobinamento e tempo para o final da transformação após o bobinamento em função da deformação aplicada é mostrado na Figura 10.3. Os dados destes gráficos foram obtidos para a condição básica, $\epsilon_2 = 0,22$, $TR = 5^\circ\text{C/s}$, $T_b = 600^\circ\text{C}$.

Com o aumento de ϵ_1 a fração transformada até o bobinamento também aumenta de 0,37 para 0,61, enquanto que o tempo para completar a transformação diminui. Observa-se que isto é resultado do efeito de ϵ_1 em elevar a Ar_3 . É importante ressaltar

que a transformação se completa dentro do período de resfriamento lento, de $0,05^{\circ}\text{C/s}$, que foi de 400 s na maioria dos ensaios. A taxa média de transformação após bobinamento não é alterada significativamente, de forma que o tempo para completar a transformação diminui com o aumento de ε_1 , simplesmente em função da maior fração transformada até o bobinamento.

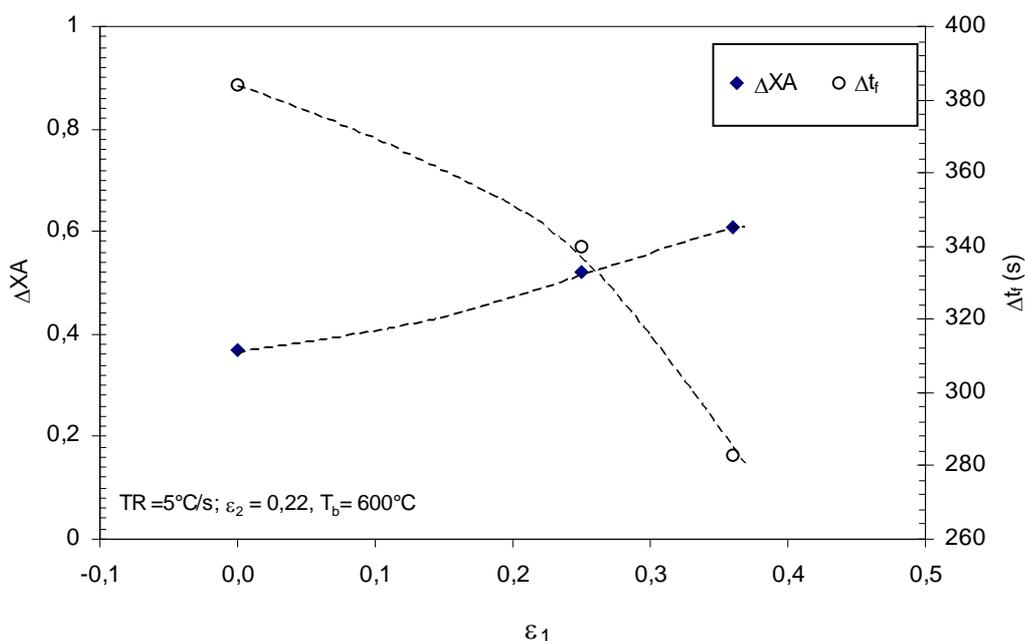


Figura 10.3 - Dependência de ΔX_A , a fração transformada até a temperatura de bobinamento, e Δt_f , intervalo de tempo no bobinamento para finalizar a transformação, no aço I-47Nb em função da deformação acima de T_{nr} , na condição $\varepsilon_2 = 0,22$, $TR = 5^{\circ}\text{C/s}$ e $T_b = 600^{\circ}\text{C}$.

10.2.2. Efeito da deformação abaixo de T_{nr}

Com o aumento da deformação ε_2 , a fração transformada até o bobinamento cresce, em consequência da elevação da temperatura A_{r3} . A Figura 10.4 mostra, como exemplo, as curvas de transformação do aço I-47Nb, ensaiado na condição básica, $\varepsilon_1 = 0,25$, $TR = 5^{\circ}\text{C/s}$, $T_b = 600^{\circ}\text{C}$, em três níveis de ε_2 . A Figura 10.5 mostra as curvas de transformação desse aço, para $TR = 10^{\circ}\text{C/s}$.

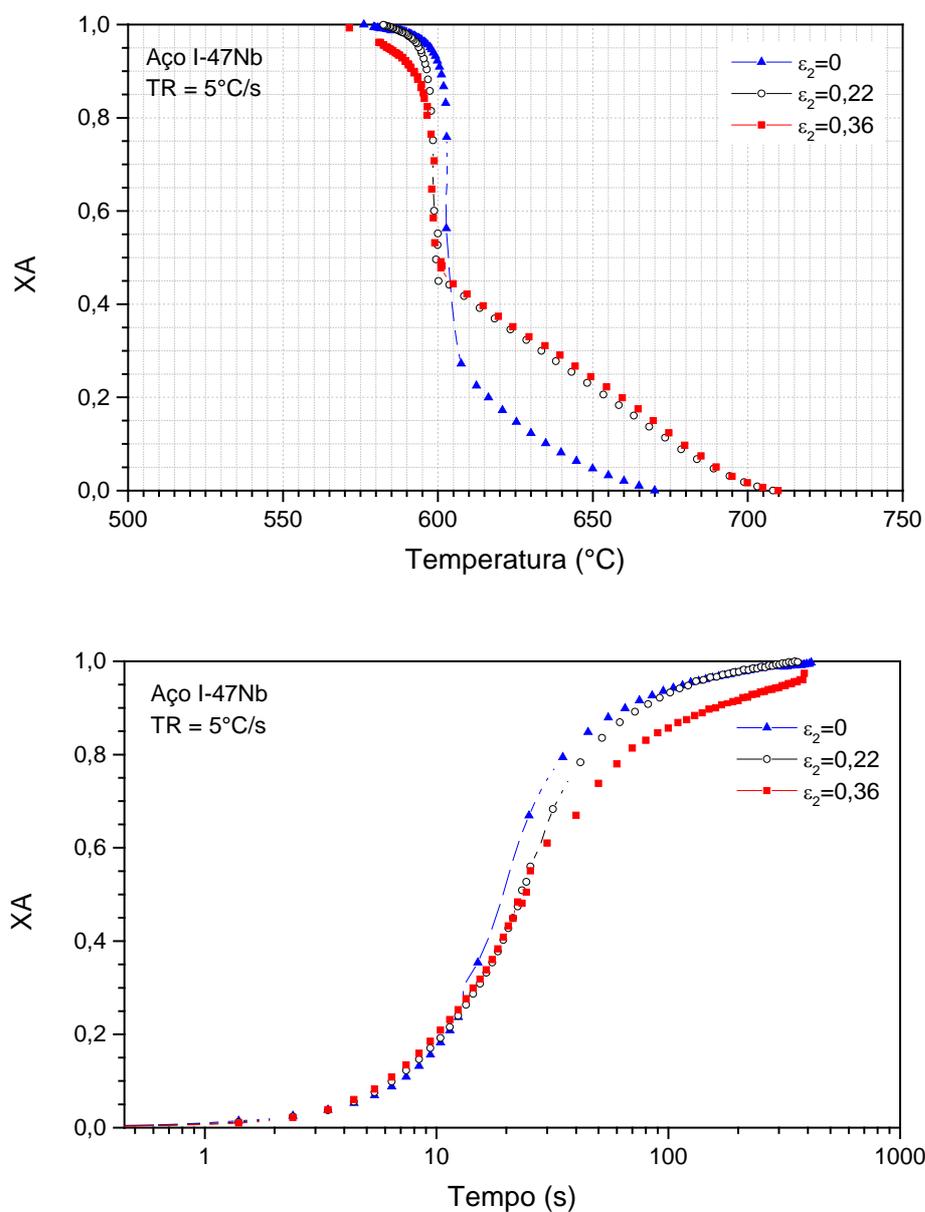


Figura 10.4 - Curvas de transformação do aço I-47Nb variando-se a deformação abaixo de T_{nr} , na condição $\epsilon_1 = 0,25$, $TR = 5^\circ\text{C/s}$, $T_b = 600^\circ\text{C}$.

Nota-se que existe uma mudança significativa da posição da curva de transformação em função da temperatura entre as condições sem e com deformação da austenita. Por outro lado, o efeito do aumento de ϵ_2 de 0,22 para 0,36 é bem menos marcante. Esta evidência é ainda mais forte quando a taxa de resfriamento passa de 5°C/s para 10°C/s . Essas considerações mostram que os efeitos das variáveis de processo na transformação da austenita, geralmente, não são lineares e possuem interações, ou seja, o efeito de

determinada variável depende do nível das outras. Isso é muito importante pois implica que não se deve tirar conclusões generalizadas sobre a transformação, baseando-se somente em experimentos realizados na condição de “alteração de uma variável de cada vez”.

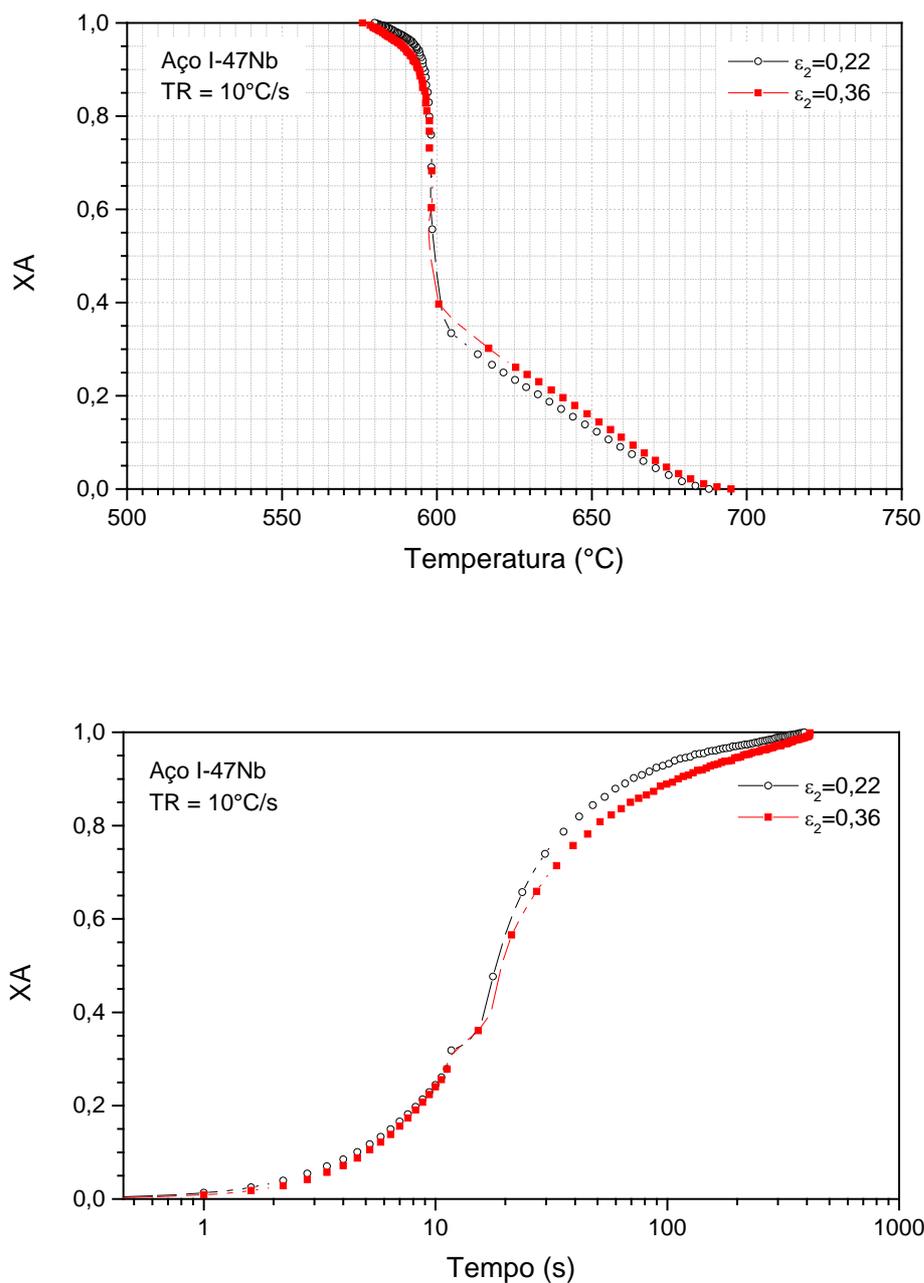


Figura 10.5 - Curvas de transformação do aço I-47Nb variando-se a deformação abaixo de T_{nr} , na condição $\epsilon_2 = 0,22$, TR = 10°C/s, $T_b = 600^\circ\text{C}$.

Os resultados de fração transformada até o bobinamento e do tempo restante de transformação estão mostrados na Figura 10.6. O comportamento da fração transformada até o bobinamento, comentado no parágrafo anterior, é evidente. Por outro lado, o tempo para o restante da transformação não apresenta tendência de queda com o aumento de ε_2 , conforme observado no efeito de ε_1 . Passando-se da condição sem deformação para austenita deformada, ocorre uma redução do tempo para o restante da transformação. Porém, passando-se ε_2 de 0,22 para 0,36, ocorre o contrário, mesmo que a fração transformada tenha aumentado. Isso implica que a taxa média de transformação após bobinamento é menor para a austenita mais deformada.

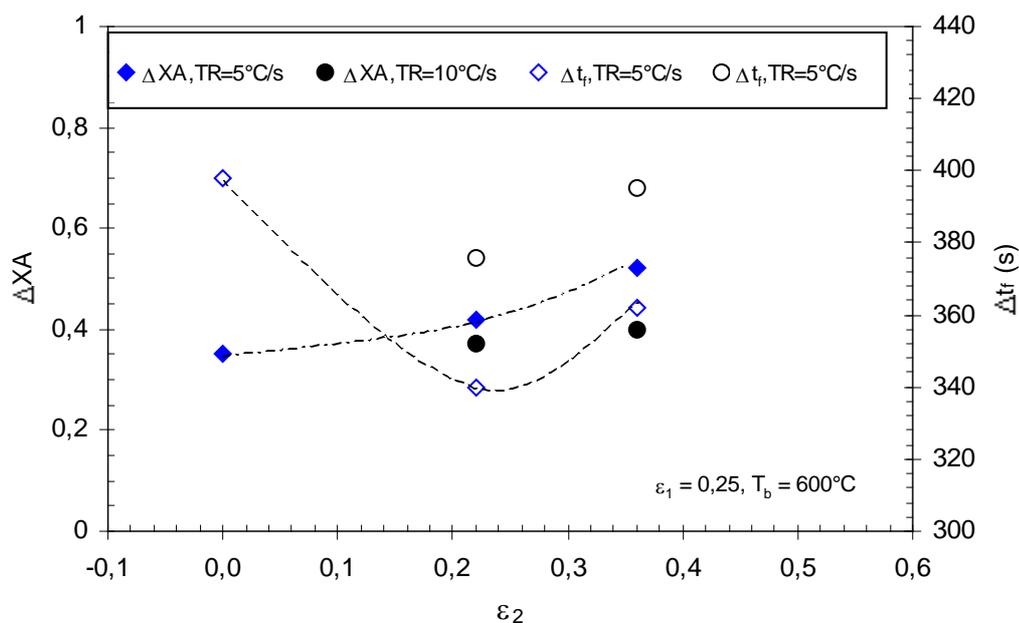


Figura 10.6 - Dependência de ΔX_A e Δt_f do aço I-47Nb com a deformação abaixo de T_{nr} , na condição $\varepsilon_1 = 0,25$ e $T_b = 600^\circ\text{C}$.

As curvas de transformação na condição sem bobinamento do aço I-47Nb são mostradas na Figura 10.7. O início da transformação é significativamente retardado pela ausência de deformação. Porém, a taxa de transformação no período inicial é maior que para a austenita deformada, de modo que o tempo total de transformação se torna menor. Isto pode ser observado na Figura 10.8. O intervalo de temperaturas de transformação acompanha o comportamento do tempo total de transformação, ou seja, a temperatura

A_{r_f} abaixa à medida que a deformação ε_2 aumenta. Comparando-se a Figura 10.8 com a 10.6, nota-se que o tempo total de transformação em resfriamento contínuo direto é muito menor que para a condição com bobinamento.

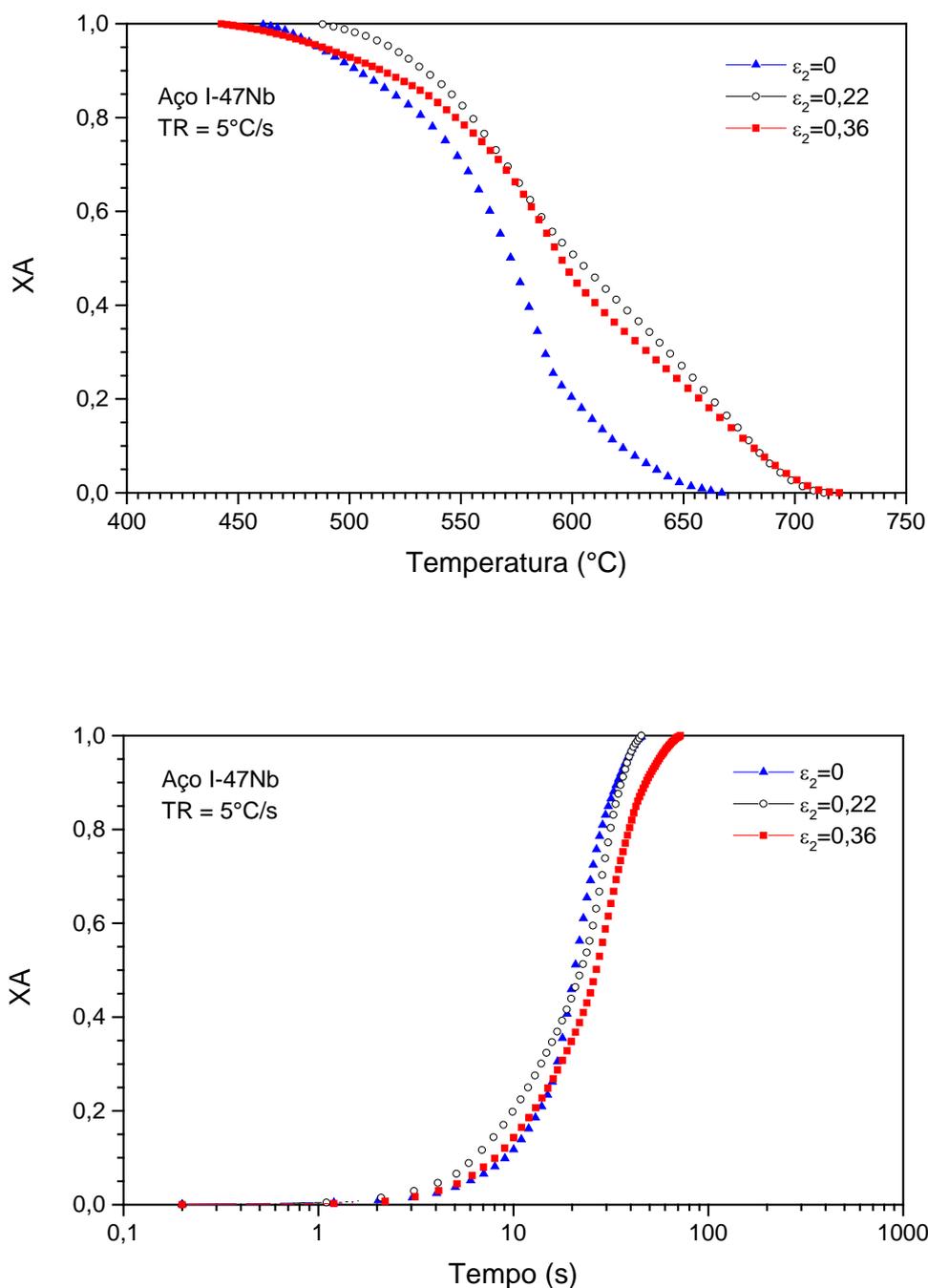


Figura 10.7 - Curvas de transformação do aço I-47Nb após diferentes deformações abaixo de T_{nr} , na condição sem bobinamento.

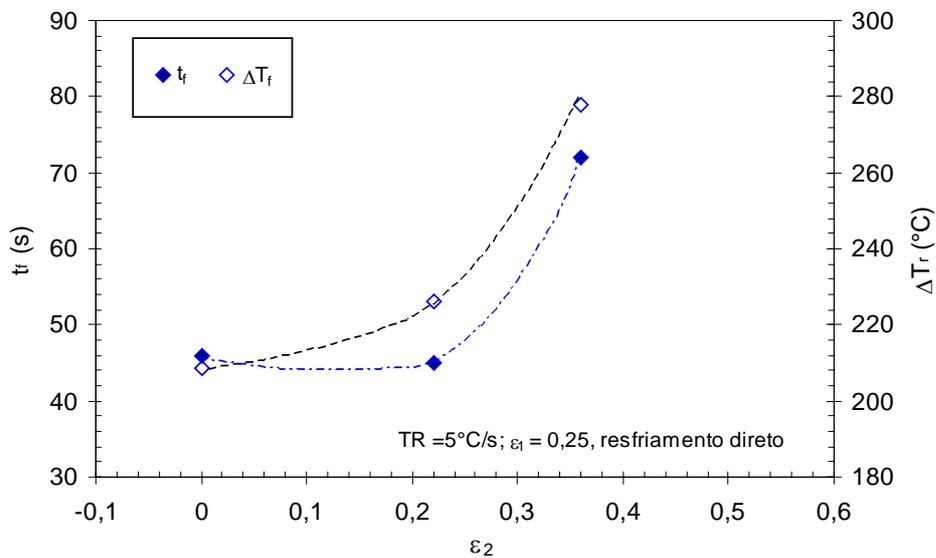
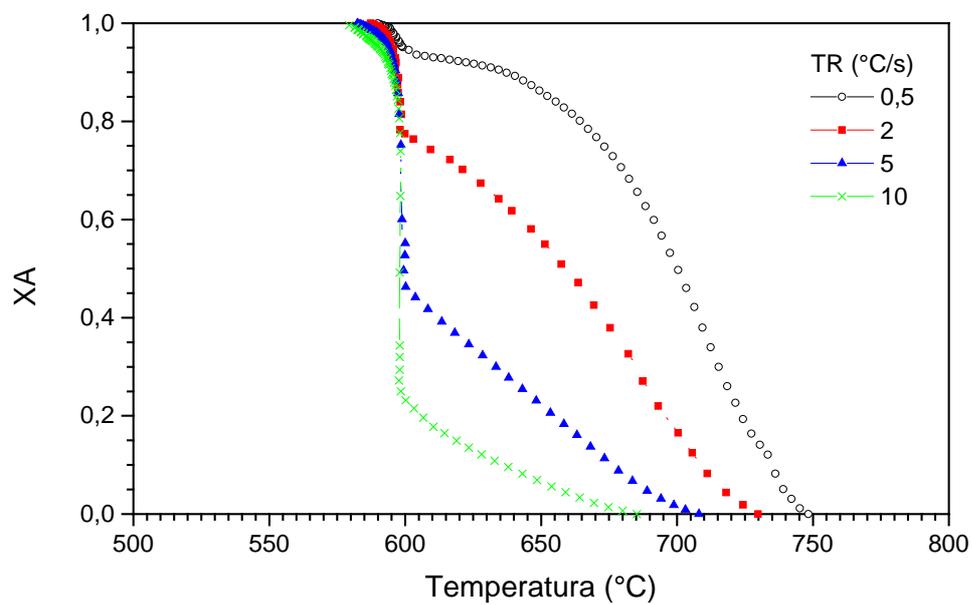


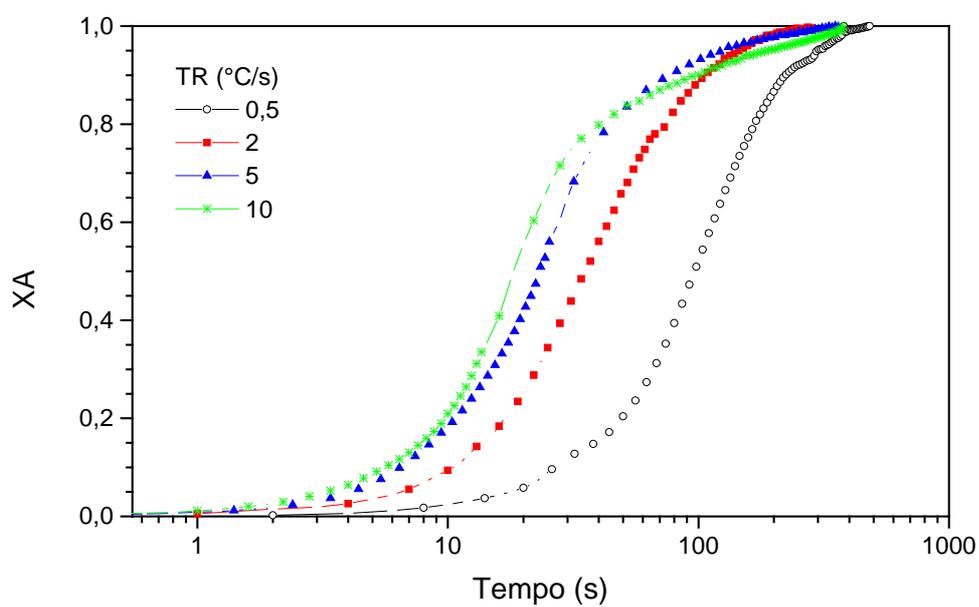
Figura 10.8 - Dependência de t_f , o tempo total de transformação, e ΔT_f , intervalo de temperatura de transformação do aço I-47Nb com a deformação abaixo de T_{nr} , na condição sem bobinamento.

10.2.3. Efeito da taxa de resfriamento

Conforme já discutido, quanto maior a taxa de resfriamento menor a temperatura de início de transformação; portanto, no instante do bobinamento, considerado nesta análise a 600°C , menor a fração transformada da austenita. Este comportamento é mostrado nas Figuras 10.9 e 10.10. Uma vez que a fração não transformada no instante do bobinamento diminui com a redução taxa de resfriamento, o tempo necessário para completar esta transformação, próximo desta temperatura, também diminui. Isto significa que, mesmo se a taxa de transformação, logo após o bobinamento, variar com a taxa de resfriamento, o efeito da menor fração de austenita não transformada vai prevalecer, resultando em finalização mais rápida da transformação, o que pode ser observado na Figura 10.10. Com isso, as temperaturas de final de transformação também aumentam com a redução da taxa de resfriamento.



(a)



(b)

Figura 10.9 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para diferentes taxas de resfriamento, na condição $\varepsilon_1 = 0,25$, $\varepsilon_2 = 0,22$ e $T_b = 600^\circ\text{C}$.

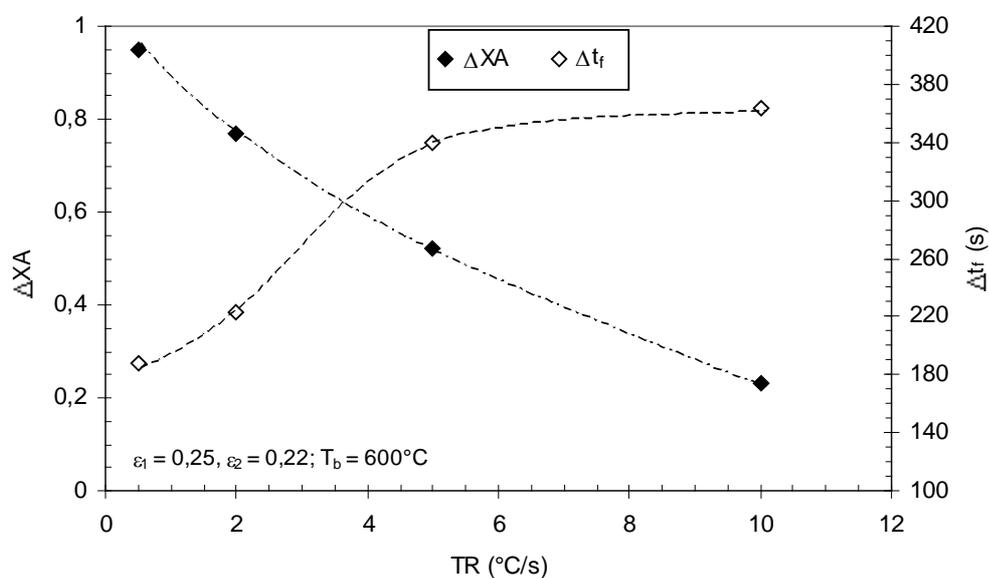
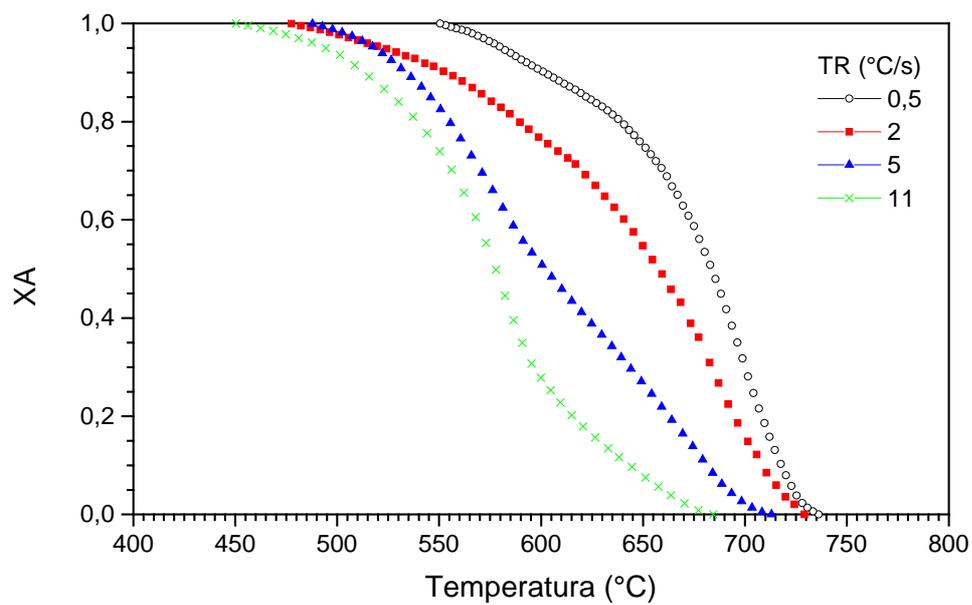


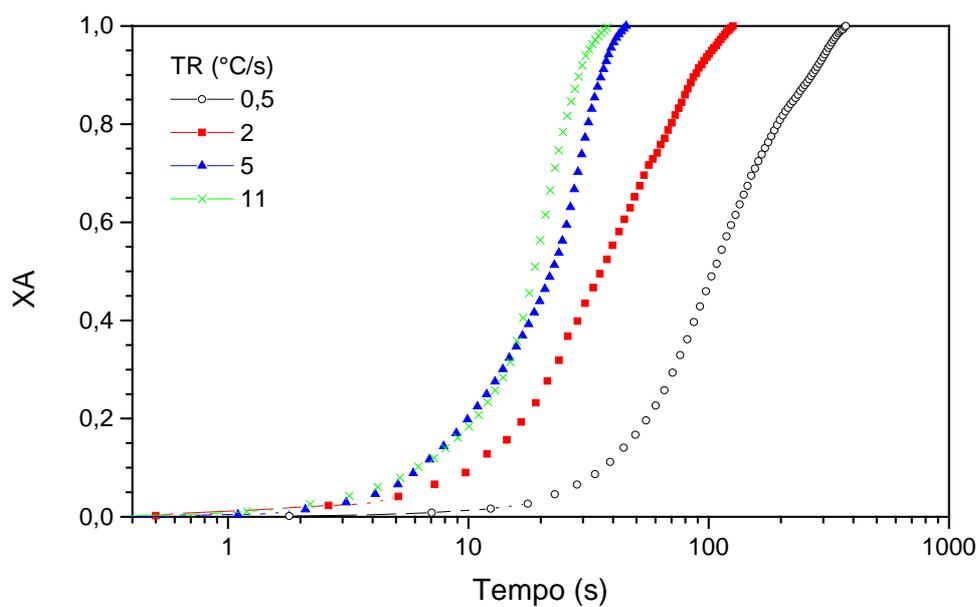
Figura 10.10 - Dependência de ΔX_A e Δt_r na transformação do aço I-47Nb com a taxa de resfriamento, na condição $\varepsilon_1=0,25$, $\varepsilon_2=0,22$; $T_b=600^\circ\text{C}$.

Na condição de resfriamento direto, sem bobinamento, observa-se o comportamento esperado, que é o abaixamento da faixa de temperatura de transformação com o aumento da taxa de resfriamento, Figura 10.11. Este deslocamento, evidentemente, provoca uma diminuição da temperatura de final de transformação. Porém, a queda da Ar_3 com o aumento da taxa de resfriamento é ainda maior do que a diminuição de Ar_f , o que leva ao estreitamento do intervalo de transformação. Este fato é comprovado pelos resultados mostrados no gráfico na Figura 10.12, eixo à direita. Portanto, a temperatura de final de transformação fica influenciada não somente pelo deslocamento, no eixo das temperaturas, da curva de transformação em função do valor da Ar_3 , mas é também função da cinética mais rápida em temperaturas mais baixas. A cinética mais rápida pode ser visualizada na Figura 10.11-b pelas curvas mais íngremes para taxas mais altas.

O decréscimo do tempo total de transformação com o aumento da taxa é percebido na Figura 10-11-b. Os valores deste tempo são fornecidos na Figura 10.12. O fato da queda deste tempo com a taxa, de forma não linear, confirma a proposição acima de que, em temperaturas mais baixas, na faixa estudada, a cinética de transformação é mais rápida.



(a)



(b)

Figura 10.11 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para diferentes taxas de resfriamento, na condição sem bobinamento.

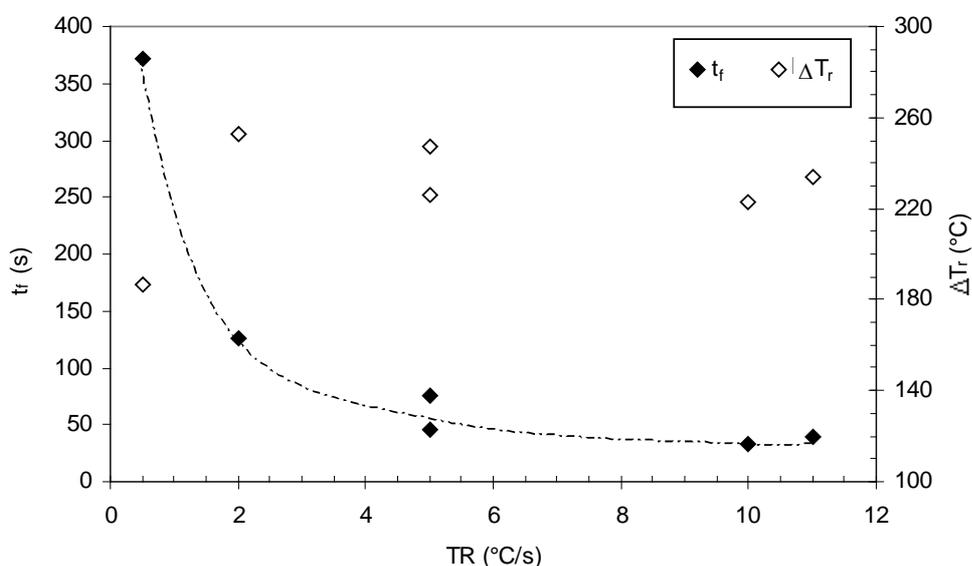


Figura 10.12 - Dependência de t_f e ΔT_r , na transformação do aço I-47Nb, com da taxa de resfriamento, na condição sem bobinamento.

10.2.4. Efeito da temperatura de bobinamento

Procurou-se fazer uma avaliação do efeito da temperatura de bobinamento no tempo total de transformação e na taxa média após bobinamento. Sabe-se que as curvas em “C”, obtidas na transformação isotérmica da austenita, apresentam um tempo mínimo em determinada temperatura, o qual corresponde à taxa máxima de transformação. O conceito de taxa máxima, entretanto, não pode ser diretamente aplicado ao resfriamento contínuo em duas etapas, como estudado neste trabalho, pois, como já mencionado, a taxa de transformação depende, além da temperatura, da própria fração transformada. Assim, a taxa média obtida em determinada temperatura é relativa.

Tendo-se em mente tais considerações, foram construídos gráficos da fração transformada em função da temperatura e do tempo, para todos os aços estudados, comparando-se os ensaios em diferentes temperaturas de bobinamento. Foram levantados o tempo total de transformação, t_f , e a taxa média de transformação (TMT) após o bobinamento, para todos os ensaios em todos os aços. No processo industrial, seria interessante o conhecimento destes parâmetros para estimativa do momento de término de transformação da austenita após o bobinamento.

A Figura 10.13 mostra as curvas de transformação do aço I-47Nb em função da temperatura e do tempo, em temperaturas de bobinação variando entre 550°C e 650°C. Fica evidenciado que, imediatamente após o bobinação, ocorre significativa transformação do material num intervalo de temperatura muito curto. Próximo do final de transformação, a taxa diminui drasticamente, estendendo muito o tempo gasto no processo. Este comportamento foi verificado em todos os aços estudados.

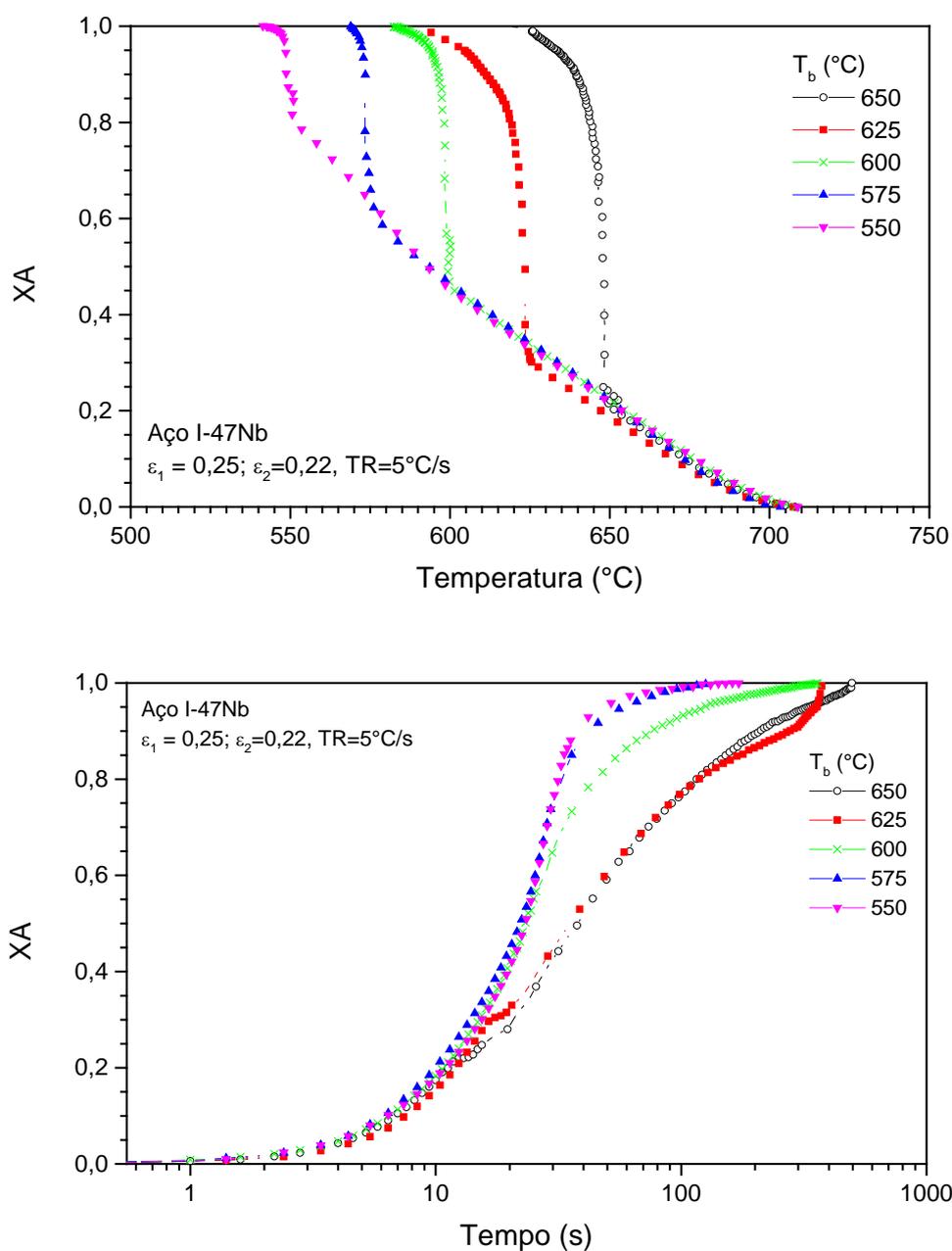
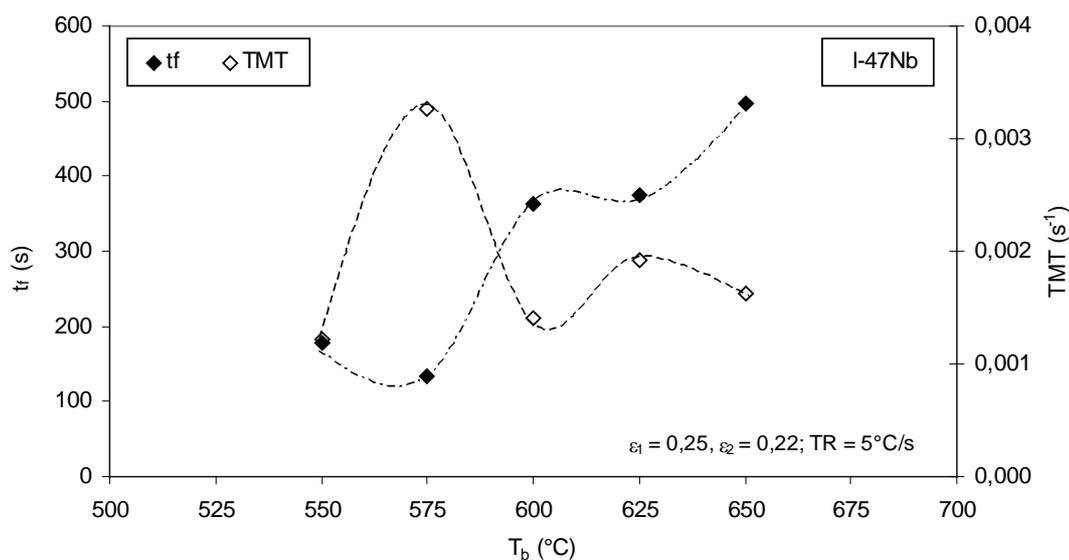


Figura 10.13 - Curvas de transformação do aço I-47Nb para temperaturas de bobinação entre 650°C e 550°C na condição base de ensaio.

Ao se comparar o bobinamento em 650°C com o em 550°C, o tempo total de transformação é sempre maior na primeira temperatura. A 550°C, praticamente toda a transformação já havia ocorrido sob regime de resfriamento rápido. Porém, em temperaturas intermediárias, não se observou uma tendência clara de variação do tempo total de transformação. Nas Figura 10.14-a e 10.14-b são mostrados os gráficos deste tempo em função da temperatura de bobinamento para os aços I-47Nb e P-68Nb, sendo que o comportamento deste último foi semelhante ao dos outros aços produzidos em escala piloto. A condição de ensaio relativa a estes resultados foi a base, $\varepsilon_2 = 0,22$; TR = 5°C/s. Os resultados do aço I-47Nb indicam um mínimo de tempo total na temperatura de 575°C, enquanto que para os aços fabricados em escala piloto, o valor mínimo foi na temperatura de 550°C.



(a)

Figura 10.14 – Dependência de t_f e TMT, a taxa média de transformação após bobinamento, com a temperatura de bobinamento dos aços I-47Nb e P-68Nb.

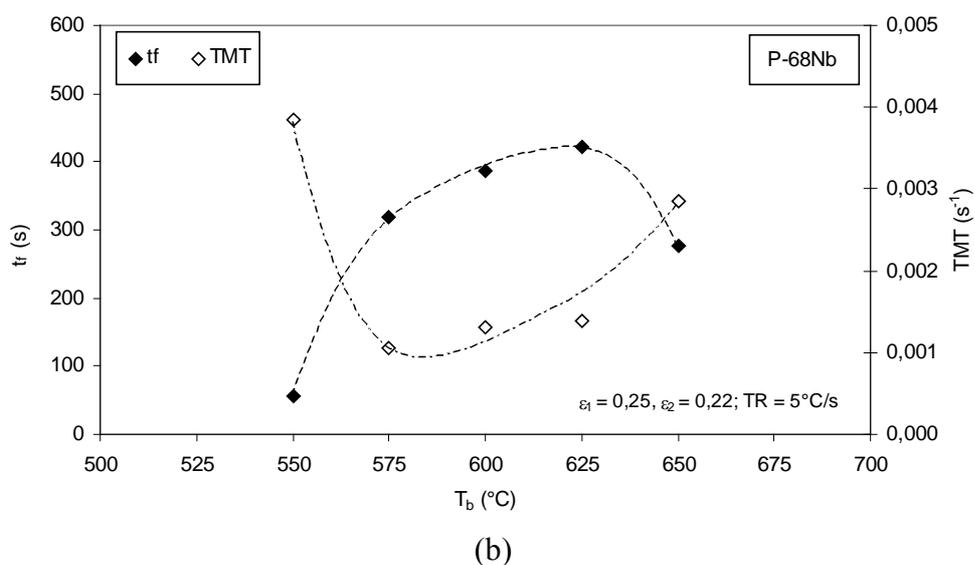
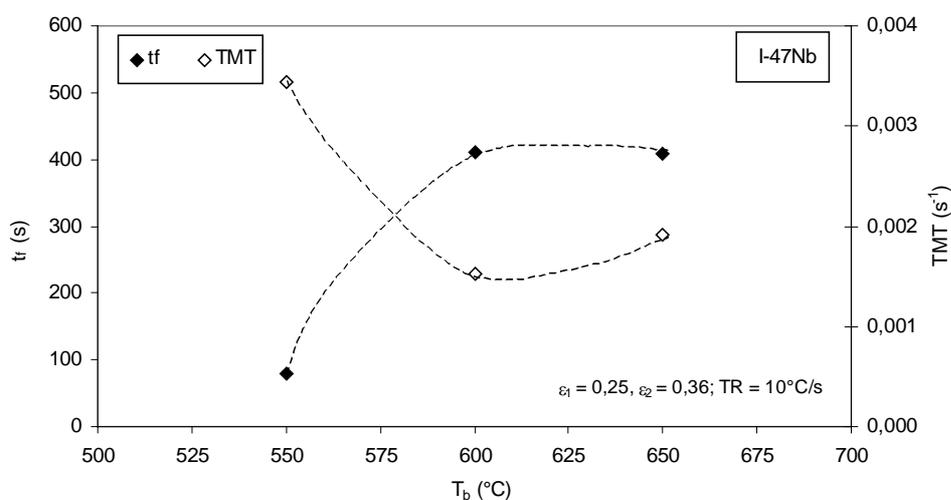


Figura 10.14– (Continuação).

O comportamento da curva de taxa média de transformação foi o oposto daquele do tempo total de transformação. Isto significa que, como comentado, os valores de taxa média dessa forma calculados, não representam a verdadeira taxa de transformação nesta temperatura, mas resultam da circunstância da transformação. A título de exemplo, mostram-se na Figura 10.15 esses parâmetros para os ensaios com o aço I-47Nb, desta vez com $\varepsilon_2 = 0,36$ e $TR = 10^\circ C/s$. Comportamento similar foi observado para os aços fabricados em escala piloto, nestas condições de ensaio.

Figura 10.15 – Dependência de t_f e TMT na transformação do aço I-47Nb com a temperatura de bobinamento na condição $\varepsilon_2 = 0,36$ e $TR = 10^\circ C/s$.

10.2.5. Efeito do teor de Nb e da rota de processamento do aço na transformação

Para se analisar o efeito do teor de Nb no aço, foram traçadas curvas de transformação em função da temperatura e do tempo, comparando-as por aço, em condições similares de ensaio. Na Figura 10.16 é mostrado um exemplo de tais curvas para a condição base de ensaio, $\varepsilon_1 = 0,25$; $\varepsilon_2 = 0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$. Além da comparação das curvas para $T_b = 600^\circ\text{C}$, são mostradas também as curvas para $T_b = 650^\circ\text{C}$ e $T_b = 550^\circ\text{C}$ relativas ao aço I-47Nb. As curvas seguem trajetórias similares até a temperatura de bobinamento, não se notando efeito do Nb. Uma análise qualitativa do comportamento relativo das curvas após o bobinamento, considerando-se todos os aços e condições de ensaio, não permitiu visualizar efeito significativo do teor de Nb e nem da rota de processamento do aço.

Assim, foram determinados os parâmetros tempo de transformação, t_f , e taxa média de transformação após o bobinamento, TMT, para os ensaios realizados. Os gráficos da Figura 10.17 mostram os resultados destes parâmetros. Não houve um comportamento sistemático dos resultados que se pudesse associar ao efeito do Nb ou da rota de processamento. Pôde-se apenas observar que o aço processado industrialmente, I-47Nb, tende a apresentar tempos maiores de transformação, exceto na condição base. A ausência de uma relação sistemática dos parâmetros analisados com o teor de Nb ou a rota de processamento deve ser consequência do fato da cinética de transformação de fases resultar de uma interação complexa entre muitas variáveis, que afetam tanto a taxa de nucleação, responsável pela temperatura Ar_3 , quanto o crescimento da fase nucleada, que influi diretamente no tempo de transformação.

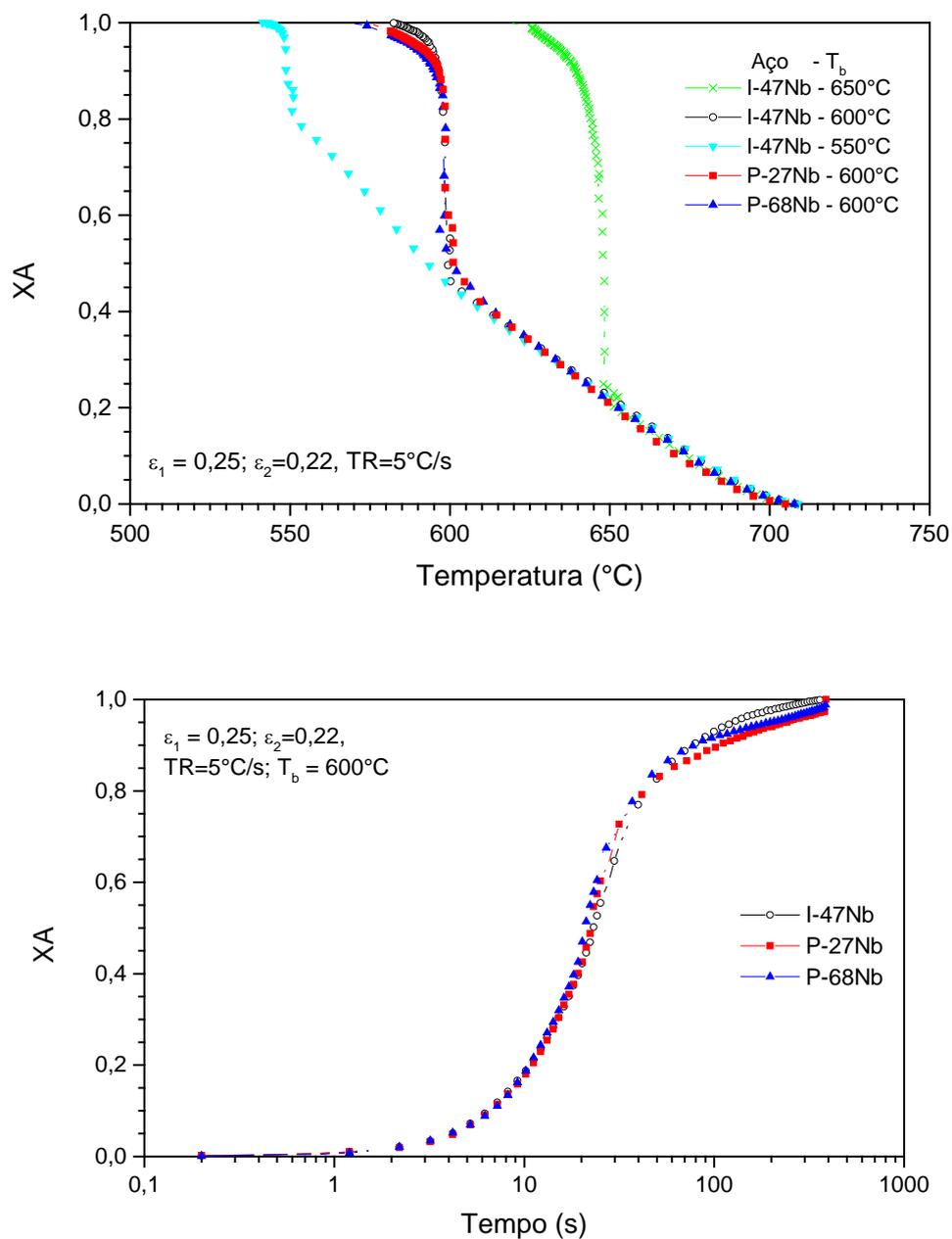


Figura 10.16 - Comparação das curvas de transformação dos aços estudados para a condição base de ensaio.

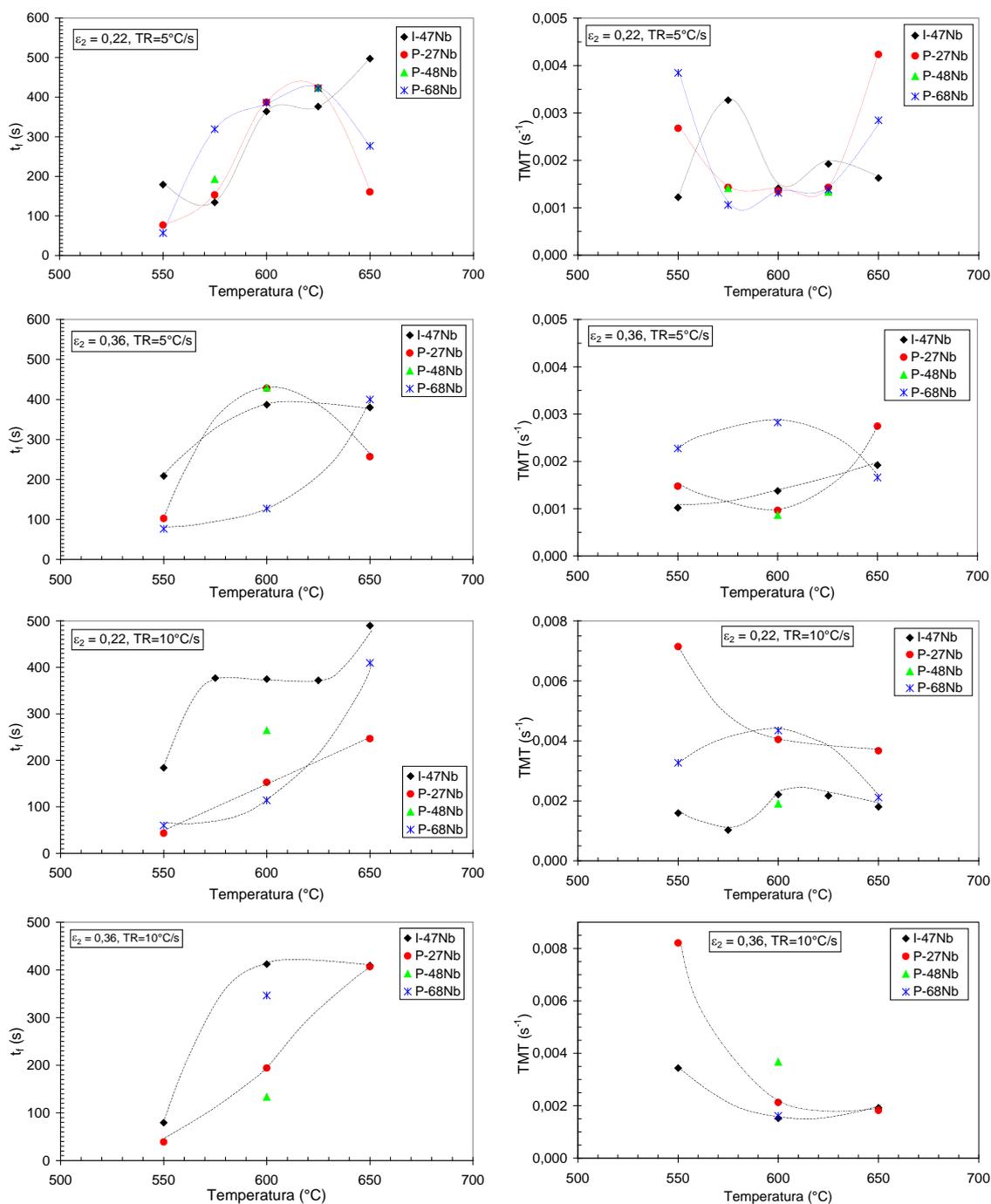


Figura 10.17 - Comparação dos parâmetros t_f e TMT relativos à cinética de transformação dos aços estudados.

Manohar¹⁰⁸ concluiu que as variáveis que elevam a Ar_3 tendem a aumentar também o tempo de transformação. Neste aspecto, as observações deste trabalho estão de acordo com suas conclusões. Isto é explicado porque se a transformação se iniciar em

temperaturas mais baixas, as taxas são mais elevadas, diminuindo o tempo para completar a transformação.

Se o aço processado industrialmente apresentar maiores tempos de transformação é possível que a precipitação interfásica seja mais intensa, dado que tais precipitados dificultam o crescimento da nova fase pelo ancoramento dos contornos de grão¹¹⁸. No entanto, a análise da evolução da precipitação antes e durante a transformação de fases requer recursos avançados de microscopia de transmissão o que foge ao escopo do presente estudo.

Foi mostrado no Capítulo 8 que o teor de Nb não afetou estatisticamente a Ar_3 . Então não surpreende o fato de não ter sido observado efeito significativo na cinética global. Os resultados mostrados na Figura 10.17 indicam ainda que, se houver algum efeito quantificável do teor de Nb e do aço, tal efeito não é sistemático, ou seja, depende do nível das outras variáveis do processo, além do próprio aço. Portanto, do ponto de vista fenomenológico, seria muito complicada a interpretação deste efeito e, principalmente, o desenvolvimento de formulações matemáticas para descrevê-lo na transformação. Com isso, optou-se pelo uso de ferramentas estatísticas para o modelamento de parâmetros da cinética de transformação, como se mostra a seguir.

10.3. Modelamento da Cinética de Transformação

Os vários métodos encontrados na literatura para se modelar a cinética de transformação foram apresentados, em linhas gerais, no item 3.8. A utilização da equação de Avrami tem sido bastante freqüente devido à sua relativa simplicidade e pela sua adequação ao descrever a transformação não somente para ferrita^{10,130,132}, mas também perlita^{8,138} e bainita^{145,146}. Esta metodologia foi aplicada com sucesso pelo presente autor para se modelar a cinética de transformação em aços CMn¹⁶. Uma vantagem adicional do modelamento via equação de Avrami com a regra da aditividade é a não necessidade de cálculos termodinâmicos de forças motrizes durante a transformação.

Um modelo de cinética de transformação, cuja equação básica permite calcular diretamente a cinética dispensando o uso da regra da aditividade, foi também aplicado a aços CMn¹⁸⁶. Porém, o sucesso deste modelo restringiu-se à formação da ferrita, assim,

não parecendo adequado para a presente situação onde são formadas outros constituintes além da ferrita, e o resfriamento ocorre a duas taxas distintas.

Diante dessas considerações, optou-se por modelar a transformação dos aços estudados aplicando-se a equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade.

A equação de Avrami, fornecida anteriormente, é dada novamente em (10.1).

$$X = 1 - \exp(-bt^n) \quad (10.1)$$

A fração transformada X varia entre 0 e 1, de forma que, se for modelada somente a transformação para ferrita, o primeiro termo precisa ser normalizado, o que é feito dividindo-o pela fração de equilíbrio da ferrita, ou pela fração medida final.

O expoente n está relacionado ao modo de nucleação da nova fase, conforme discutido no item 3.3.4. De acordo com Tamura⁹³ a ferrita nucleia nos contornos de grão da austenita e a transformação procede por saturação de sítios, de forma que $n=1$. Resultados de vários estudos na literatura obtiveram realmente valores de n muito próximos de 1, quando a transformação para ferrita foi contemplada^{8,9,54,112,113,138}. Para a transformação para perlita e bainita, Tamura propõe valores de $n = 4$, sugerindo que tais transformações ocorrem por nucleação e crescimento. No entanto, diversos estudos^{8,138,145-146} publicados mostraram valores de n para perlita e bainita na faixa de 1 a 1,5.

Qualquer que seja seu valor, n precisa ser constante, ou depender apenas da fração transformada e/ou da composição química para que a regra da aditividade seja válida. Lee et al.¹¹⁸ propuseram uma formulação que melhor ajustou-se aos seus dados, onde n variou ao longo da transformação entre 1 e 0,5, sendo escrito como uma função quadrática da fração transformada. A regra da aditividade foi aplicada à equação de Avrami no modelo de Lee et al. Nakata e Militzer¹¹² também utilizaram a formulação de n variando ao longo da transformação, em parte dos ajustes do seu modelo.

O parâmetro b é dependente da temperatura, sendo às vezes, dado também em função da composição química^{8,152}. Tem sido suposto teoricamente e algumas vezes também

utilizado^{161,174,187} um valor de b seguindo uma função do tipo Arrhenius, dada em (10.2), onde Q_R é a força motriz ou energia de ativação aparente de transformação.

$$b = k_0 \exp(-Q_R / RT) \quad (10.2)$$

Em alguns dos estudos em que b foi definido pela expressão (10.2), tal como o realizado por Singh et al.¹⁸⁷, não houve aplicação da regra da aditividade, ou seja, o cálculo da fração transformada foi feito aplicando-se somente a equação de Avrami em função da temperatura e do tempo de transformação. No caso destes autores, foi ajustada uma expressão para Q_R em função da taxa de resfriamento, a qual foi a única variável de processo estudada. Depreende-se, então, que Q_R seria um parâmetro dependente das condições de ensaio, e não um valor intrínseco da transformação austenita para ferrita, relacionada a algum mecanismo.

Por outro lado, Militzer et al.^{13,106,112} utilizaram, em vários estudos, uma definição diferente para b , conforme equação (10.3), porém essa formulação não foi justificada pelos autores. Nesta expressão, $\Delta T = Ae_3 - T$, é o super-resfriamento abaixo de Ae_3 , e A e B são constantes cujos valores dependem do condicionamento da austenita e da taxa de resfriamento.

$$b = \exp(A\Delta T + B) \quad (10.3)$$

Deve-se mencionar aqui que em todos os estudos de modelamento da transformação da austenita em resfriamento contínuo encontrados na literatura faz-se uso de uma taxa de resfriamento constante durante os ensaios. Esta é, como se percebe do relatado até aqui, uma situação diferente da proposta neste estudo, em que o resfriamento se dá em duas etapas, com o emprego de duas taxas.

Após estudos, verificou-se que a utilização das metodologias de Lee et al.¹¹⁸ e de Singh et al.¹⁸⁷ aos resultados dos ensaios deste trabalho foi menos promissora que a aplicação da equação de Avrami/regra da aditividade.

Diante dessas considerações optou-se por modelar a cinética de transformação dos aços estudados aplicando-se a equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade,

tendo o parâmetro b sido expresso pela equação (10.3), evitando-se assim, como já mencionado, o cálculo de forças motrizes ligadas à estimativas de Q_R . O procedimento de aplicação da regra da aditividade ao modelo de transformação foi apresentado no item 3.8.2. Os parâmetros a serem ajustados para cada condição de ensaio (cada curva de transformação) são, a princípio, A , B e n .

10.3.1. Modelo da cinética de transformação pela equação de Avrami

Uma rotina computacional para determinação dos parâmetros A e B para cada curva de transformação foi desenvolvida utilizando-se o método de minimização dos resíduos quadrados. Esta rotina é fornecida em anexo. Foi colocada a opção de entrada nesta rotina para o parâmetro n variar continuamente, ao longo da transformação, desde 1 até qualquer valor entre 0,1 e 1,9. Evidentemente, esta opção cobre a maioria de possibilidades encontradas na literatura para n , inclusive a usada por Lee et al.¹¹⁸, onde n variou de 1 a 0,5. Também, cobre a forma mais simples de n , que é um valor constante e igual a 1. Os outros dados de entrada da rotina são uma matriz com o tempo, temperatura e fração transformada.

Com essa rotina, foi realizado um grande número de simulações da cinética para todos os aços e todos os ensaios, utilizando-se estas diferentes formas de variação de n .

Foram realizadas simulações considerando-se somente a formação da ferrita, fazendo-se a normalização da fração transformada, conforme comentado anteriormente. Todavia, para isso é necessário conhecer a temperatura de final de formação de ferrita, cuja determinação não é trivial, sendo objetivo do próprio modelamento da transformação. Assim, para se modelar somente a formação da ferrita, necessita-se conhecer o momento em que cessa sua formação, uma vez que a decomposição da austenita resultou em outros constituintes também. Por sua vez, o momento que termina a formação da ferrita depende do conhecimento da cinética de transformação, ou seja, o modelo de cinética e a temperatura de término de formação da ferrita são funções mutuamente dependentes. Então, essa abordagem foi abandonada, mesmo porque o objetivo do trabalho contemplava um modelamento da cinética global.

Passou-se, então, a se modelar a transformação total, ou seja, a se obter um conjunto único de parâmetros A , B e n para se descrever a transformação completa da austenita.

Uma análise global das simulações com n variando ao longo da transformação indicou que, na maioria dos ensaios, a determinação de A e B supondo-se $n=1$ em toda a transformação, forneceu o melhor ajuste, isto é, a menor variância residual.

Assim, nas análises subsequentes $n=1$ fica implicitamente considerado. A aproximação entre curvas de transformação calculadas e medidas foi, em geral, satisfatória. A título de exemplo, são mostradas na Figura 10.18 tais curvas para os ensaios que foram objeto de ilustração dos resultados dilatométricos (Figura 10.1). Estes ensaios foram realizados na condição básica, $\varepsilon_1 = 0,25$; $\varepsilon_2 = 0,22$ e $TR = 5^\circ\text{C/s}$.

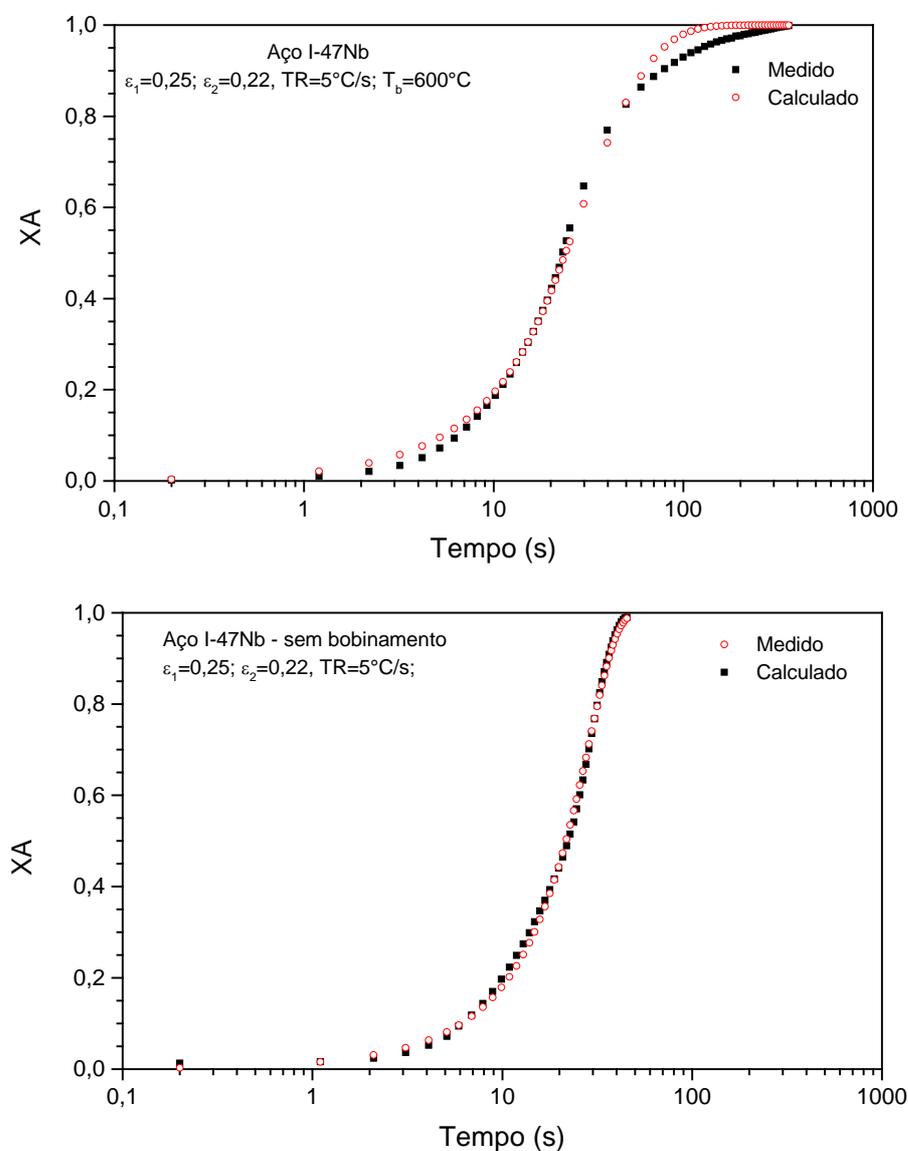


Figura 10.18 - Exemplos de curvas de transformação da austenita medidas e calculadas pela formulação de Avrami e regra da aditividade.

No ensaio com bobinamento, a temperatura de interrupção do resfriamento rápido foi de 600°C. É interessante observar que o bom ajuste é obtido para as condições com e sem bobinamento. Isso indica que, realmente, a cinética de transformação pode ser modelada pela equação de Avrami conjugada com a regra da aditividade, sendo o resfriamento contínuo em taxa constante ou variável.

Os valores dos parâmetros A e B, equação (10.3), obtidos para os ensaios realizados com os aços I-47Nb, P-27Nb, P-48Nb e P-68Nb são dados nas Tabelas de 10.1 a 10.4, nesta ordem. Mostra-se, também, nestas tabelas o resíduo médio para o ajuste do modelo de transformação, s_r , dado pela equação (10.4). Este parâmetro é uma medida do erro de ajuste do modelo¹⁸⁸. O número de pontos N de cada curva de transformação na maioria dos casos situou-se entre 150 e 400. XA_m é o valor medido da fração transformada, e XA_c o correspondente valor calculado pelo modelo proposto.

$$s_r = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (XA_{m,i} - XA_{c,i})^2}{N - 2}} \quad (10.4)$$

Na maioria dos ensaios o erro médio s_r ficou bem abaixo de 0,05. Isto é, a diferença entre o cálculo e o valor real da fração transformada ficou, em média, abaixo de um valor que pode ser considerado uma medida do erro experimental de determinação de porcentagem de fases por metalografia quantitativa. Assim, pode-se considerar satisfatória a precisão do modelo.

O bom ajuste do modelo às curvas medidas atesta a aplicabilidade do procedimento proposto (Avrami mais regra da aditividade) para a transformação onde ocorre mudança da taxa de resfriamento, mesmo que esta mudança seja brusca como neste estudo. Certamente isto decorre do fato de que a curva de transformação versus tempo (veja curva de fração transformada versus tempo na Figura 10.1-a) não apresenta descontinuidade no momento dessa mudança. Essas observações constituem evidência de que este procedimento possa ser aplicável a qualquer regime de resfriamento contínuo, e estão em acordo com as conclusões de Kamat et al.²⁷. Assim, este procedimento seria adequado para aplicação ao processo industrial de laminação de tiras a quente, no qual a taxa de resfriamento não é constante.

Tabela 10.1 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço I-47Nb.

Ensaio	Condições				Parâmetros de ajuste		
	ε_1	ε_2	TR (°C/s)	T _b (°C)	A	B	sr
160	0,25	0	5	605	0,0240	-8,32	0,0266
159	0,25	0,22	2	RD	0,0065	-4,86	0,0198
158	0,25	0,22	2	600	0,0043	-4,55	0,0247
157	0,25	0,36	10	650	-0,0170	-0,91	0,0405
156	0,25	0,36	10	550	0,0110	-5,15	0,0108
153	0,25	0,36	10	600	0,0010	-3,73	0,0425
149	0,25	0,36	5	550	0,0117	-5,49	0,0174
136	0,25	0,22	5	600	0,0080	-4,99	0,0229
135	0,25	0,22	5	600	0,0084	-5,25	0,0278
125	0,25	0,22	10	600	0,0700	-4,75	0,0288
124	0,25	0,22	0,5	RD	0,0102	-6,28	0,0332
123	0,25	0,22	5	RD	0,0139	-5,86	0,0157
120	0,25	0,22	5	575	0,0124	-5,69	0,0131
117	0,25	0,22	5	625	-0,0108	-2,26	0,0478
114	0,36	0,22	5	RD	0,0133	-5,79	0,0093
113	0,36	0,22	5	600	0,0065	-4,49	0,0208
112	0	0,5	5	600	0,0103	-5,15	0,0115
109	0	0,22	5	RD	0,0223	-8,27	0,0228
107	0	0,22	5	600	0,0102	-5,73	0,0224
106	0	0,22	5	600	0,0169	-6,20	0,0131
105	0,25	0,22	0,5	600	0,0120	-6,20	0,0282
104	0,25	0,22	11	RD	0,0213	-7,74	0,0164
84	0,25	0,36	8,2	600	0,0030	-3,95	0,0527
82	0,25	0	9	600	-0,0049	-2,93	0,0851
80	0,25	0	5	RD	0,0235	-8,56	0,0312
74	0,25	0,36	9	RD	0,0175	-6,30	0,0156
73	0,25	0,36	5	RD	0,0113	-5,62	0,0140
72	0,25	0,36	5	550	0,0117	-5,28	0,0164
71	0,25	0,36	5	650	-0,0045	-3,29	0,0382
69	0,25	0,36	5	600	-0,0028	-3,21	0,0504
67	0,25	0,22	8	550	0,0192	-6,91	0,0150
66	0,25	0,22	8	650	-0,0181	-1,06	0,0372
65	0,25	0,22	9	575	0,0227	-7,57	0,0215
64	0,25	0,22	2	600	0,0227	-7,57	0,0306
63	0,25	0,22	2	RD	0,0054	-4,65	0,0103
62	0,25	0,22	9	625	-0,0110	-1,70	0,0365
61	0,25	0,22	9	600	0,0107	-5,68	0,0419
60	0,25	0,22	10	RD	0,0180	-6,67	0,1230
59	0,25	0,22	5	550	0,0151	-6,20	0,0138
58	0,25	0,22	5	650	-0,0121	-2,18	0,0327
54	0,25	0,22	5	600	-0,0190	-0,64	0,0791
43	0,25	0,22	5	550	0,0150	-6,22	0,0138
42	0,25	0,22	5	RD	0,0106	-5,54	0,0100
41	0,25	0,22	5	650	-0,0058	-2,99	0,0170
38	0,25	0,22	5	RD	0,0116	-5,76	0,0131

RD: resfriamento direto, sem bobinamento

Tabela 10.2 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço P-27Nb.

Ensaio	Condições				Parâmetros de ajuste		
	ϵ_1	ϵ_2	TR (°C/s)	T_b (°C)	A	B	s_r
155	0,22	0,39	10	550	0,0189	-6,52	0,0081
154	0,22	0,39	10	650	0,0067	-4,60	0,0286
151	0,2	0,38	10	600	0,0192	-6,57	0,0127
147	0,22	0,39	5	550	0,0132	-5,33	0,0138
146	0,22	0,39	5	650	0,0100	-4,96	0,0261
143	0,22	0,39	5	600	0,0162	-6,05	0,0167
139	0,23	0,23	10	550	0,0202	-6,99	0,0089
137	0,24	0,24	10	650	0,0158	-6,38	0,0081
133	0,23	0,23	10	600	0,0249	-8,10	0,0191
130	0,24	0,24	5	550	0,0174	-6,39	0,0094
126	0,26	0,24	5	650	0,0119	-5,26	0,0130
121	0,26	0,24	5	575	0,0156	-5,89	0,0101
118	0,26	0,24	5	625	0,0101	-5,21	0,0339
102	0,25	0,22	5	575	0,0193	-6,49	0,0101
55	0,27	0,23	5	600	0,0082	-4,97	0,0465
35	35	0,26	0,22	RD	0,0154	-5,07	0,0082

Tabela 10.3 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço P-48Nb.

Ensaio	Condições				Parâmetros de ajuste		
	ϵ_1	ϵ_2	TR (°C/s)	T_b (°C)	A	B	s_r
150	0,2	0,38	10	600	0,0185	-6,56	0,0147
144-A	0,22	0,39	5	600	0,0084	-4,65	0,0333
142	0,22	0,39	5	600	0,0092	-4,72	0,0267
141	0,19	0,39	5	600	0,0110	-4,98	0,0146
134	0,23	0,23	10	600	0,0161	-5,89	0,0763
119	0,25	0,24	5	575	0,0145	-5,80	0,0150
115	0,24	0,23	5	625	0,0024	-3,93	0,0397
56	0,27	0,24	5	600	-0,0183	-0,92	0,0870
39	0,27	0,22	5	RD	0,0158	-6,01	0,0097
24	0,37	0,22	5	RD	0,0114	-5,17	0,0087

Tabela 10.4 - Parâmetros do modelo para a cinética de transformação do aço P-68Nb.

Ensaio	Condições				Parâmetros de ajuste		
	ϵ_1	ϵ_2	TR (°C/s)	T_b (°C)	A	B	s_r
152	0,21	0,38	10	600	0,0091	-5,21	0,0399
148	0,22	0,39	5	550	0,0129	-5,33	0,0110
145	0,21	0,39	5	650	0,0013	-3,78	0,0372
144-B	0,2	0,38	5	600	0,0139	-5,43	0,0144
140	0,23	0,23	10	550	0,0211	-7,31	0,0065
138	0,24	0,24	10	650	-0,0004	-3,71	0,0229
132	0,23	0,23	10	600	0,0230	-7,57	0,0135
131	0,24	0,23	5	550	0,0156	-5,97	0,0088
127	0,22	0,23	5	650	0,0107	-5,45	0,0193
122	0,26	0,24	5	575	0,0166	-6,45	0,0288
116	0,24	0,23	5	625	0,0015	-3,83	0,0387
51	0,27	0,22	5	600	0,0110	-5,43	0,0404
44	0,22	0,2	5	RD	0,0128	-5,86	0,0289
36	0,26	0,21	5	RD	0,0119	-5,75	0,0089
23	0,36	0,22	5	RD	0,0164	-6,20	0,0108

10.3.2. Análise dos parâmetros do modelo da cinética

10.3.2.1. Relação entre os parâmetros do modelo

Observou-se que os parâmetros A e B estão correlacionados. À medida que B diminui, em valor numérico, A aumenta, o que pode ser constatado nas Tabelas de 10.1 a 10.4. Foram, então, construídos gráficos de B em função de A para todos os aços, tomando-se os resultados de todos os ensaios. Verificou-se que os pontos ficaram alinhados, mesmo quando foram incluídos os resultados de A e B obtidos com o ajuste de modelos à cinética para o parâmetro n crescente ou decrescente.

Na Figura 10.19 são mostrados tais gráficos para os quatro aços estudados, considerando-se os valores mostrados nas Tabelas de 10.1 a 10.4. Nestes gráficos são mostradas também as equações de ajuste linear dos pontos experimentais. Pelo elevado valor de r^2 , percebe-se a boa qualidade do ajuste.

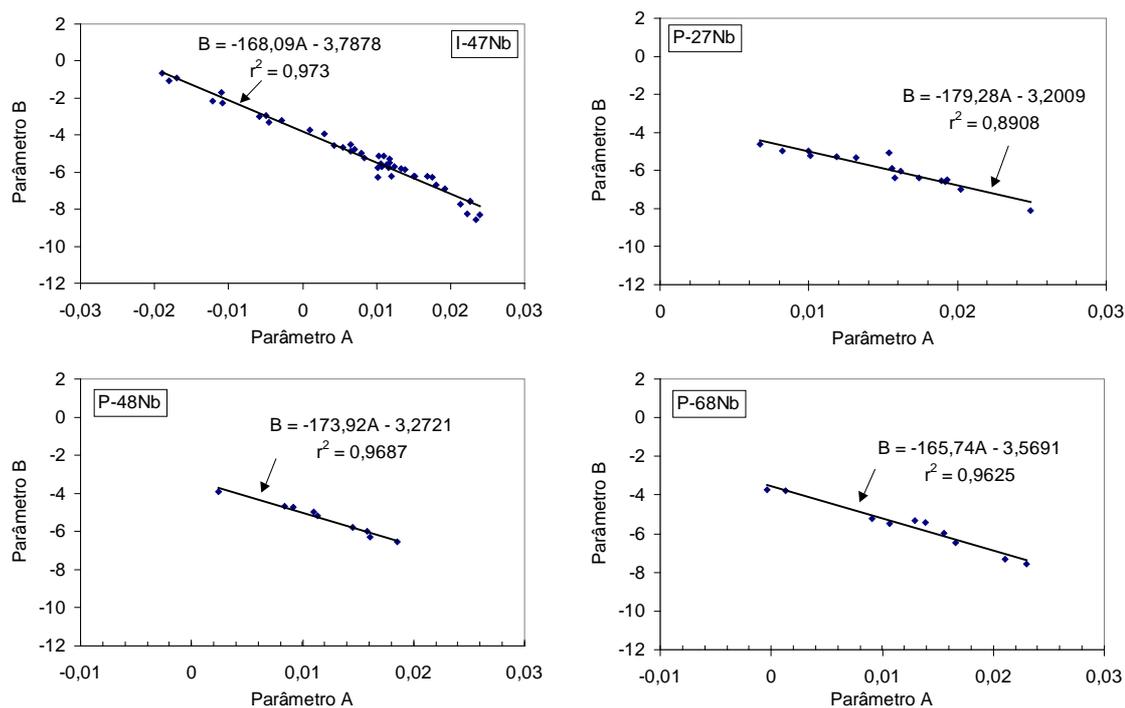


Figura 10.19 - Relação entre os parâmetros A e B determinados nos ensaios.

A verificação da dependência linear entre A e B é muito interessante aos fins de um modelamento matemático da transformação, pois reduz a quantidade de parâmetros necessários, especialmente quando o intuito é o desenvolvimento de modelos voltados para aplicação em processos industriais. Estabelecendo-se uma relação entre A e B, sendo n constante, basta que um dos parâmetros acima seja descrito em função das variáveis do processo, deformações, taxa de resfriamento e temperatura de bobinamento, para que para o modelo seja completo. Além deste aspecto, o fato da cinética ser descrita por apenas um parâmetro, além de n, permite uma interpretação melhor da transformação, como será visto adiante neste item.

Quando os pontos (A,B) de todos os aços são colocados no mesmo gráfico, conforme Figura 10.20, observa-se que o alinhamento verificado para o aço I-47Nb é similar ao dos demais, indicando que uma mesma relação matemática pode descrever a relação entre A e B, independente do aço. Novamente, isto é interessante para o modelamento por permitir usar apenas uma relação para todos os aços. A relação entre A e B obtida neste trabalho é dada em (10.5).

$$B = -(162,97A + 3,6768) \quad (10.5)$$
$$r^2 = 0,9568$$

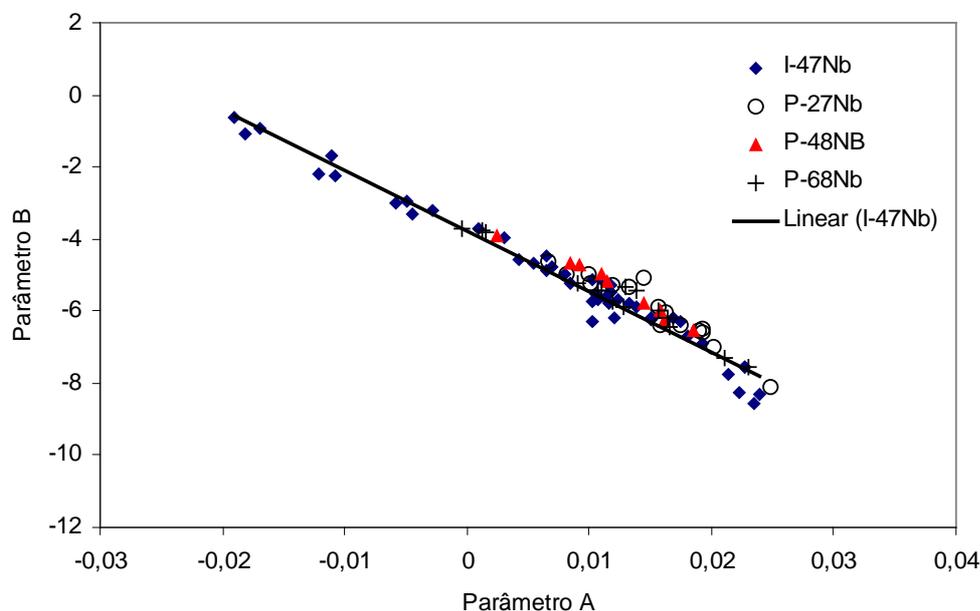


Figura 10.20 - Relação geral entre os parâmetros A e B para todos os aços.

A metodologia utilizada no presente trabalho foi similar à de Militzer et al.^{13,54,106,112-113}, citada em vários trabalhos, porém, em nenhum destes, tais pesquisadores analisaram a relação entre A e B. Foram, então, tomados os valores de A e B determinados por Nakata e Militzer^{112,113}, mais recentemente, e comparados aos obtidos no presente trabalho. Esses autores estudaram um aço microligado ao Nb com altos teores de Ti e Mn. Tais dados são apresentados na Figura 10.21. Nota-se que os valores de A e B de Nakata e Militzer varreram uma faixa bastante mais ampla, porém ficaram alinhados com inclinação similar à do presente trabalho. Isto sugere que a cinética de transformação dos aços estudados é governada por algum mecanismo onde somente um parâmetro é necessário para descrevê-la, além de n. Tal aspecto será explorado a seguir.

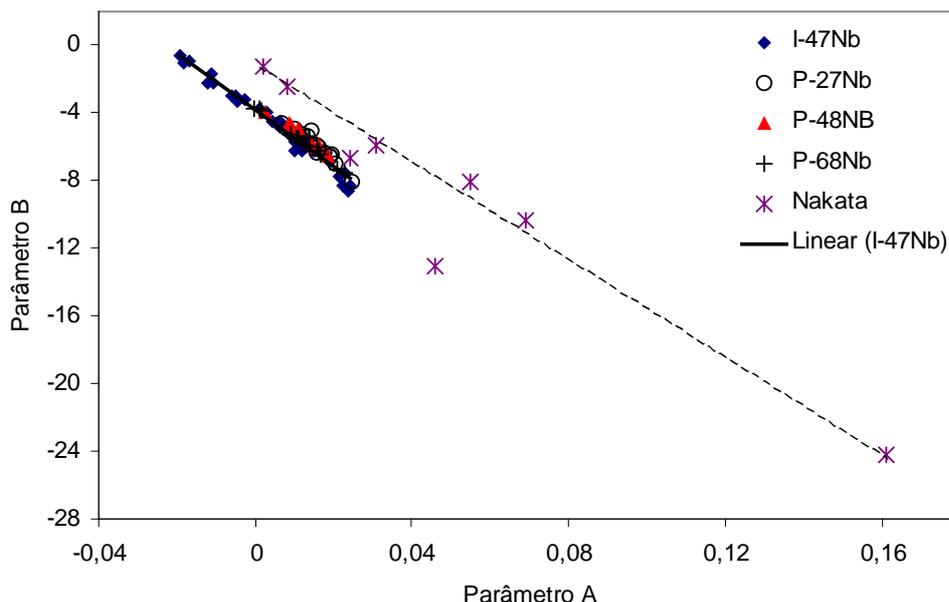


Figura 10.21 - Parâmetros A e B para os aços estudados comparados com resultados de literatura.

10.3.2.2. Interpretação dos parâmetros do modelo

O valor unitário de n , obtido como o de melhor ajuste do modelo de transformação, indica que a cinética é controlada em toda sua extensão pela saturação de sítios⁹², ou seja, forma-se uma grande quantidade de núcleos logo no início da transformação, saturando os sítios mais favoráveis energeticamente. Estes sítios são os contornos de grão da austenita e defeitos intragranulares, tais como bandas de deformação. Posteriormente, a reação avança pelo crescimento destes núcleos. O valor constante de n , neste caso o unitário, garante a validade da regra da aditividade, conforme discutido no item 3.8.1.1, o que assegura que o procedimento utilizado foi matematicamente bem fundamentado.

Além disso, diversos trabalhos na literatura apontam para o mecanismo controlador de saturação de sítios como aquele responsável à formação da ferrita^{8,9,54,92,112,113,138}, de tal forma que os resultados aqui obtidos seriam, de certa forma, esperados. No caso da perlita, valores de n acima de 1 têm sido reportados^{8,140}, porém Suehiro et al.⁸⁰⁻⁸⁴ citam a possibilidade da formação deste constituinte ser controlada pela saturação de sítios, ao invés de pela nucleação e crescimento. A nucleação da perlita ocorre preferencialmente

nas interfaces α/γ durante a transformação. Os resultados obtidos neste trabalho estão de acordo com esta hipótese. Uma vez que a microestrutura obtida nos ensaios realizados foi constituída praticamente por ferrita e perlita, parece plenamente justificável o emprego do valor unitário para n .

Com relação ao parâmetro b do modelo, sua interpretação é menos elementar. Conforme as deduções de Cahn⁹¹, b é função das taxas de nucleação e de crescimento e da temperatura. No entanto, no caso de saturação de sítios, a taxa de crescimento da nova fase fica preponderante. Esta taxa, por sua vez, é função da temperatura e da fração transformada. Portanto, b deve ser função da temperatura e da fração transformada. Mas como a fração transformada está relacionada à temperatura, existe uma redundância, nas relações, e b pode ser escrito em função apenas da temperatura.

No presente modelo, como já citado, foi utilizada a equação de Avrami, (10.1), conjugada com a regra da aditividade, sendo que o parâmetro b foi dado pela relação (10.3). Singh et al.¹⁸⁷, conforme já citado, modelaram a decomposição da austenita em ferrita, em dois aços CMn comuns, expressando b por (10.2), que é uma equação do tipo Arrhenius. A energia de ativação para transformação Q_R foi descrita como uma função linear da taxa de resfriamento. Então Q_R depende do ensaio e, conseqüentemente, não é uma verdadeira energia de ativação, a qual deveria depender apenas da composição química. Talvez Q_R pudesse ser interpretado como uma força motriz média para a transformação. Sendo energia de ativação ou força motriz, um valor constante durante a transformação significaria que o mesmo mecanismo, por exemplo o difusional, estaria controlando a transformação. É interessante, então, fazer uma comparação dessas formas de modelamento da cinética de transformação objetivando encontrar suas similaridades.

No modelamento de Singh et al.¹⁸⁷ não foi usada a regra da aditividade. Esta forma de modelamento foi, então, testada para os ensaios do presente trabalho. Foi possível modelar assim a cinética de transformação dos aços aqui estudados, sendo que os valores de Q_R obtidos foram comparáveis aos apresentados por Singh et al.¹⁸⁷. Todavia, a qualidade do ajuste do modelo aos resultados foi inferior à obtida com a aplicação da regra da aditividade, em todos os ensaios. Por exemplo, a Figura 10.22 mostra uma

comparação entre os ajustes obtidos para dois dos ensaios, onde é percebida tal conclusão, tanto de forma qualitativa quanto pelo valor de s_r .

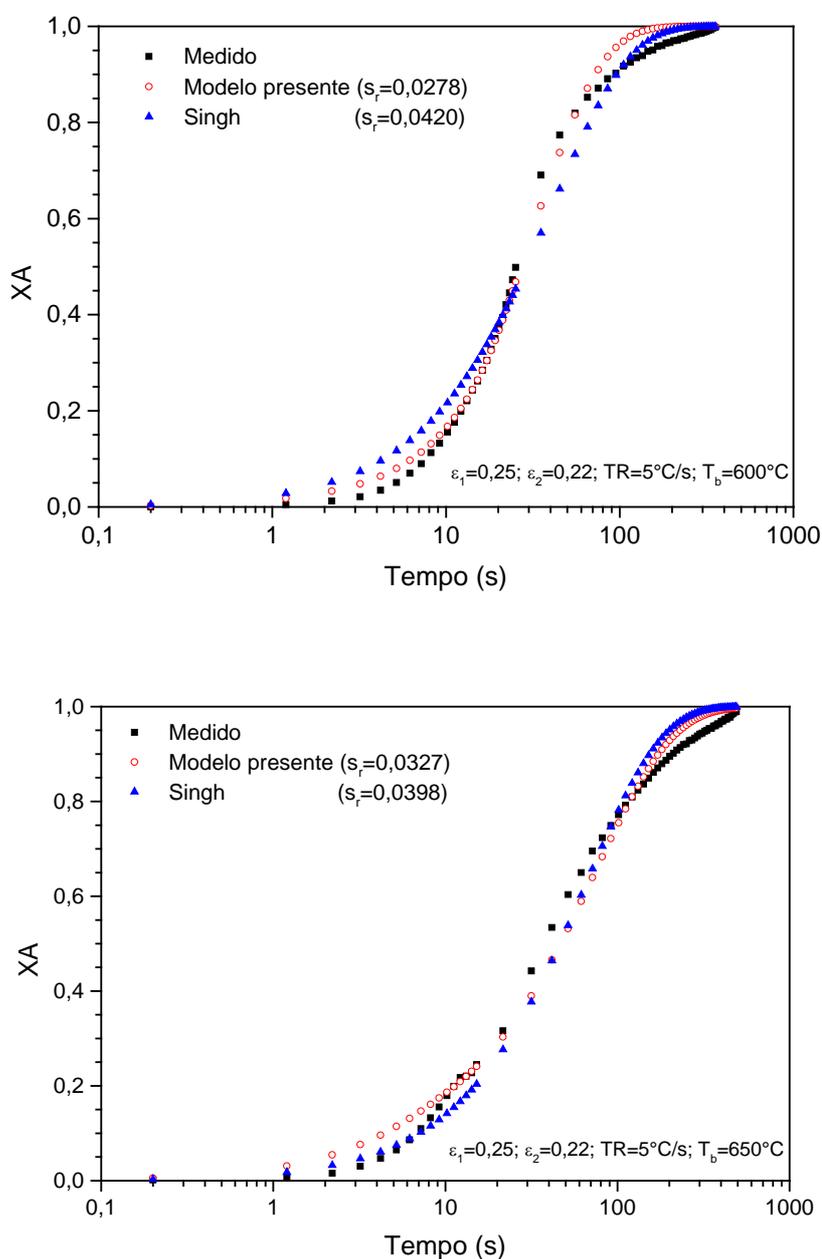


Figura 10.22 - Comparação entre curvas da cinética de transformação, em dois ensaios com o aço I-47Nb, calculadas pelo presente modelo e pela formulação de Singh et al.

Se, por um lado, a aplicação do procedimento de Singh et al.¹⁸⁷ forneceu um ajuste razoável aos resultados experimentais, é possível, por outro lado, que o conceito

envolvido seja útil para a interpretação do parâmetro B e, conseqüentemente, de b. Comparando-se, então, as equações (10.2) e (10.3), obtém-se:

$$-e^{(A\Delta T+B)} = -k_0 e^{-Q_R/RT} \quad (10.6)$$

Tomando-se o logaritmo natural dos termos da equação (10.6), chega-se a:

$$B + A(Ae_3 - T) = \ln k_0 - \frac{Q_R}{RT} \quad (10.7)$$

A equação (10.7) pode ser rescrita como:

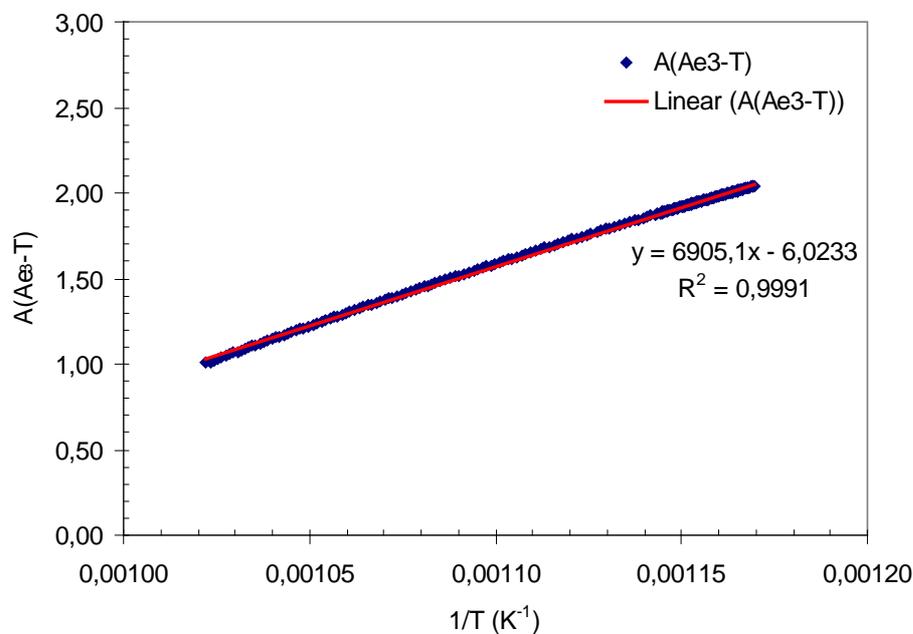
$$A(Ae_3 - T) = -\frac{Q_R}{RT} - B + \ln k_0 \quad (10.8)$$

Para cada curva de transformação, se esta relação for verdadeira, um gráfico de $A(Ae_3 - T)$ em função de $1/T$ deve fornecer uma reta e, de sua inclinação, pode ser obtido o valor da energia de ativação aparente, Q_R . Do intercepto com o eixo das ordenadas, pode ser obtido o valor de k_0 . Vale lembrar que a temperatura T no segundo membro é dada em Kelvin. Deve-se ter em mente também que Q_R não é um valor intrínseco do material, mas depende da força motriz para a transformação, que é função de variáveis de processo, tamanho de grão, deformação da austenita e taxa de resfriamento. Portanto, Q_R é um valor dependente do ensaio, assim como os parâmetros A e B.

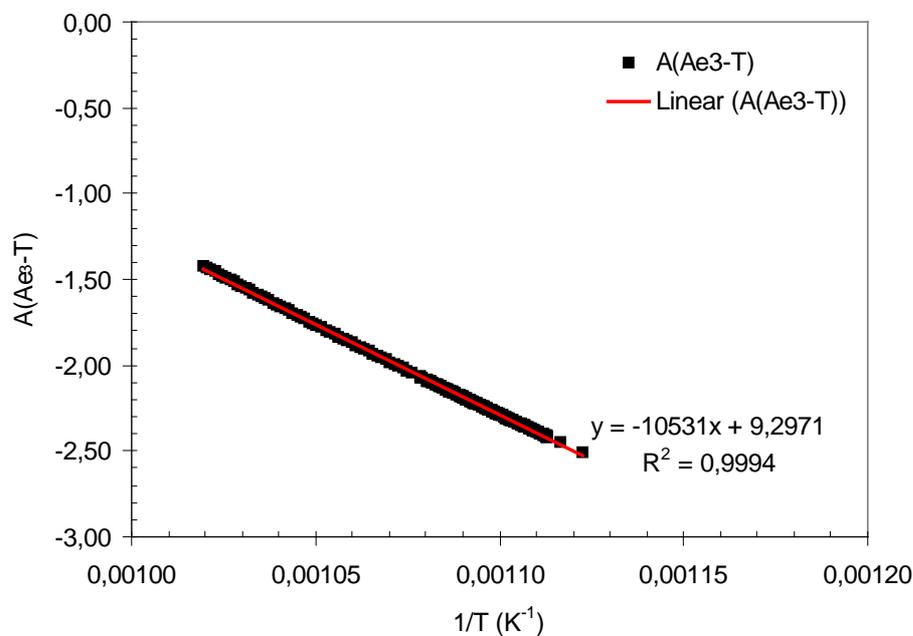
Para todos os ensaios realizados foram traçados os gráficos citados no parágrafo anterior, e foi verificado que houve um ótimo alinhamento dos pontos, cuja reta de mínimos quadrados forneceu um coeficiente de determinação entre 0,95 e 0,99. Para ilustrar tais gráficos, são mostrados na Figura 10.23 aqueles relativos a dois ensaios do aço I-47Nb, um na condição base e outro com $T_b=650^\circ\text{C}$. São os mesmos ensaios cujas curvas são mostradas na Figuras 10.22. Os pontos experimentais e a linha da reta ajustada praticamente se confundem.

Deve-se frisar que o relacionamento estabelecido pela equação (10.8) e Figura 10.23 é puramente matemático, não tendo respaldo estatístico, pois as variáveis dos dois termos

são dependentes. O conceito de correlação estatística pressupõe uma variável independente, obtida de uma população com distribuição normal, e outra dependente, e entre as quais objetiva-se verificar um eventual correlacionamento¹⁸⁸.



(a) $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ\text{C/s}$; $T_b=600^\circ\text{C}$.



(b) $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ\text{C/s}$; $T_b=650^\circ\text{C}$.

Figura 10.23 - Gráficos da variação do parâmetro $A(\text{Ae}_3\text{-T})$ em função do inverso da temperatura para dois ensaios com o aço I-47Nb.

Observa-se na Figura 10.23 que a inclinação em um dos gráficos é positiva e no outro é negativa. Analisando-se a equação (10.8) depreende-se que o seu sinal tem que ser o mesmo do parâmetro A. Portanto, na maioria dos ensaios a inclinação foi positiva, o que pode ser comprovado pela análise dos valores de A, dados na Tabela 10.1. Sendo positiva a inclinação, o valor de Q_R fica negativo, o que não tem fundamento físico. Ou seja, o valor numérico de Q_R não pode ser uma energia ou de ativação ou motriz para a transformação. O valor de Q_R , determinado quando se modela a transformação via equação de Avrami e regra da aditividade, deveria, então, ser considerado, a princípio, apenas um parâmetro de ajuste. Mas ainda seria possível sua interpretação como descrito adiante.

É interessante que o fato de ter sido determinado um par (k_0, Q_R) para cada ensaio, significa que a cinética de transformação poderia ser modelada pela conjugação do parâmetro b definido pela expressão (10.2) com a regra da aditividade, fornecendo um melhor ajuste que a aplicação da equação de Avrami somente com os valores diretos de b obtidos pela equação (10.2). Na verdade, o modelamento empregando-se Avrami e b definido por (10.2) é obtido diretamente dos parâmetros A e B, pois estes e k_0 e Q_R são interdependentes, como mostrado a seguir.

Como o ajuste linear foi sistemático para todos os ensaios, existe uma correlação entre os parâmetros A e B do presente modelo com k_0 e Q_R . Expressando-se Q_R a partir da equação (10.8) em função das demais variáveis, e lembrando que no segundo termo a temperatura está em K, tem-se:

$$Q_R = (\ln k_0 - B - A.Ae_3)R(T + 273) + AR(T + 273)T \quad (10.9)$$

A equação (10.9) expressa Q_R como uma função da temperatura, não sendo constante. Isso parece contraditório com o valor Q_R constante obtido da inclinação da reta ajustada aos pontos experimentais. A explicação para isso é que o ajuste estatístico é aproximado, enquanto que a equação (10.9) é exata. Se esta equação for aplicada aos dados dos ensaios, verifica-se que Q_R varia pouco em função da temperatura. Por exemplo, relativamente aos ensaios da Figura 10.23, os valores de Q_R calculados são mostrados na Tabela 10.5, aplicando-se três temperaturas específicas à equação (10.9).

Nesta tabela são mostrados também os valores de Q_R obtidos pela inclinação da reta e pelo modelamento da transformação de acordo com a metodologia de Singh et al.¹⁸⁷.

Tabela 10.5 - Valores de Q_R (J/mol) do aço I-47Nb, relativos a dois ensaios na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ\text{C/s}$; $T_b=600^\circ\text{C}$ e 650°C , calculados por diferentes metodologias.

T _b (°C)	Inclinação da reta	Aplicando-se a equação (10.9)			Método de Singh
		Ar ₃	Ar _f	T _b	
600	-57409	-57175	-57332	-57441	69500
650	87555	87384	87434	87603	53000

Os valores calculados pela equação (10.9) são muito próximos do valor médio estatístico determinado pela inclinação da reta. Então, do ponto de vista do objetivo de modelo do processo de transformação, poderia ser usada qualquer temperatura no intervalo de transformação para o cálculo de Q_R . Por ser um parâmetro típico do processo, pode-se utilizar, por exemplo, a temperatura de bobinamento, de forma que a equação (10.9) se transforma em:

$$Q_R \cong (\ln k_0 - B - A.Ae_3)R(T_b + 273) + AR(T_b + 273)T_b \quad (10.10)$$

Na última coluna da Tabela 10.5 são mostrados os valores de Q_R obtidos pela aplicação do método de Singh aos ensaios citados. Como esperado estes valores diferem daqueles calculados pela equação, pois o método não utiliza a regra da aditividade. Observa-se, por outro lado, que a ordem de grandeza dos valores absolutos de Q_R é equivalente. Considerando-se todos os ensaios realizados, os valores absolutos de Q_R determinados pela inclinação situaram-se na faixa de 4000 a 140000 J/mol. Isto significa que se o modelamento da decomposição da austenita dos aços aqui estudados for feita com a equação de Avrami, sendo b dado pela expressão de Arrhenius, e ainda conjugada com a regra da aditividade, os valores de Q_R podem variar numa faixa ampla, além de apresentarem, às vezes, valores negativos. Por outro lado, se este modelamento for feito com a aplicação somente da equação de Avrami, sendo b ainda dado pela expressão de Arrhenius, os valores de Q_R ficariam em torno de 50000 ~ 60000, como mostra a última

coluna da Tabela 10.5. No trabalho de Singh et al.¹⁸⁷, os valores de Q_R foram cerca de 80000 J/mol, devendo-se ter em mente que estes autores estudaram a transformação de aços CMn comuns.

Uma conclusão que pode ser tirada dessas análises é que, no modelamento da transformação utilizando uma expressão do tipo Arrhenius para b , o valor de Q_R não deve significar exatamente uma energia específica atuante. Este parâmetro seria um valor numérico, que varia com a condição de ensaio e depende do equacionamento do modelo. Mesmo não representando exatamente uma energia de ativação, Q_R pode estar relacionado a algum valor de energia associada à transformação, mas que depende das condições de ensaio.

Já foi mostrado que A e B estão relacionados. Portanto, um só parâmetro permitiu descrever a cinética de transformação (o modelamento do parâmetro B é mostrado no item seguinte). Provavelmente, então, somente um mecanismo governa a transformação dos aços estudados. Como a microestrutura foi constituída predominantemente por ferrita e perlita, o mecanismo de controle da transformação deve ser por difusão. O valor de B não apresenta por si interpretação física, mas o cálculo de Q_R pela expressão (10.9), a partir de B e A , mostra que B deve estar relacionado a um número que, conforme parágrafo anterior, estaria associado a alguma energia para a transformação.

A idéia do desenvolvimento seguinte é mostrar que tanto faz se determinar A e B ou k_0 e Q_R , num modelo de cinética de transformação, desde que se use a regra da aditividade. Especificamente, mostra-se como k_0 é obtido a partir dos parâmetros A e B , sem a necessidade de se traçarem gráficos como os mostrados na Figura 10.25.

Se Q_R é aproximadamente constante durante o progresso da transformação, então:

$$\frac{dQ_R}{dT} \cong 0 \quad (10.11)$$

Derivando a expressão (10.9) em relação à temperatura, obtém-se:

$$\frac{dQ_R}{dT} = (\ln k_0 - B - A.Ae_3)R + ART + AR(T + 273) \cong 0 \quad (10.12)$$

De onde é obtido o valor de k_0 :

$$\ln k_0 \cong A(Ae_3 - 2T - 273) + B \quad (10.13)$$

Por analogia ao desenvolvimento que resultou no cálculo analítico de Q_R , equação (10.10), k_0 poderia ser determinado substituindo-se T por T_b na equação (10.13). Entretanto, a faixa de variação de k_0 é muito ampla e o seu cálculo é muito sensível à temperatura, diferentemente de Q_R , o que resulta em variações significativas quando aplicadas diferentes temperaturas na equação (10.13). Assim, uma maneira mais precisa de se avaliar k_0 é através do seu valor médio ao longo da transformação, equação (10.14).

$$\ln \bar{k}_0 = \frac{1}{Ar_f - Ar_3} \int_{Ar_3}^{Ar_f} [A(Ae_3 - 2T_b - 273) + B] dT \quad (10.14)$$

Após integração, obtém-se:

$$\bar{k}_0 = \exp \left\{ \frac{1}{Ar_f - Ar_3} \left[[A(Ae_3 - 273) + B](Ar_f - Ar_3) - A(Ar_f^2 - Ar_3^2) \right] \right\} \quad (10.15)$$

Os valores de k_0 calculados pelo intercepto, pela aplicação da equação (10.15) e pela metodologia de Singh, relativos aos dois ensaios citados na Figura 10.23, são mostrados na Tabela 10.6. Analogamente à relação entre A e B , quando Q_R cresce, k_0 diminui, e vice-versa. Existe uma razoável proximidade entre os valores obtidos pela expressão analítica (10.15) e os gerados pelo intercepto. Porém, os valores são totalmente distintos dos obtidos com o método de Singh, o que era esperado pois este não usou a regra da aditividade.

Tabela 10.6 - Valores de k_0 (s^{-1}) do aço I-47Nb, relativos a dois ensaios na condição $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$, $TR=5^\circ C/s$; $T_b=600^\circ C$ e $650^\circ C$, calculados por diferentes metodologias.

Tb ($^\circ C$)	Intercepto da reta	Aplicando-se a equação (10.15)	Método de Singh
600	$1,271 \cdot 10^{-5}$	$1,089 \cdot 10^{-5}$	124
650	1233	1318	10

O desenvolvimento anterior mostrou que o parâmetro b pode ser modelado tanto pela expressão adotada no presente estudo quanto pela expressão do tipo Arrhenius, com mesmo nível de ajuste. Além disso, existem relações entre os parâmetros de cálculo de b, as quais foram desenvolvidas.

10.3.3. Efeito das variáveis de processo nos parâmetros do modelo

Para que o modelo de transformação seja completo, é necessário que um dos parâmetros A ou B seja expresso matematicamente em função das variáveis de processo. Para conduzir esse modelamento, foi realizada, previamente, uma análise da influência de tais variáveis nos ensaios realizados em tais parâmetros. Os quatro aços investigados foram submetidos a essa avaliação, no entanto, para simplificar, apenas os resultados relativos ao aço industrial I-47Nb são apresentados.

As deformações acima e abaixo de T_{nr} tiveram efeito sistemático de aumentar o valor numérico de B, e conseqüentemente diminuir A, Figura 10.24. Estes gráficos foram construídos para a condição base ($\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$; $TR=5^\circ C/s$ e $T_b=600^\circ C$), a menos da variável estudada no caso.

O efeito da taxa de resfriamento não pôde ser visualizado de forma sistemática, nos níveis de deformação e para os aços estudados. Por exemplo, a Figura 10.25 mostra os valores de A e B para o caso de TR variando de 0,5 a $10^\circ C/s$. Nos níveis intermediários de TR há uma tendência de queda de B com esta variável, porém não se percebe um comportamento típico geral.

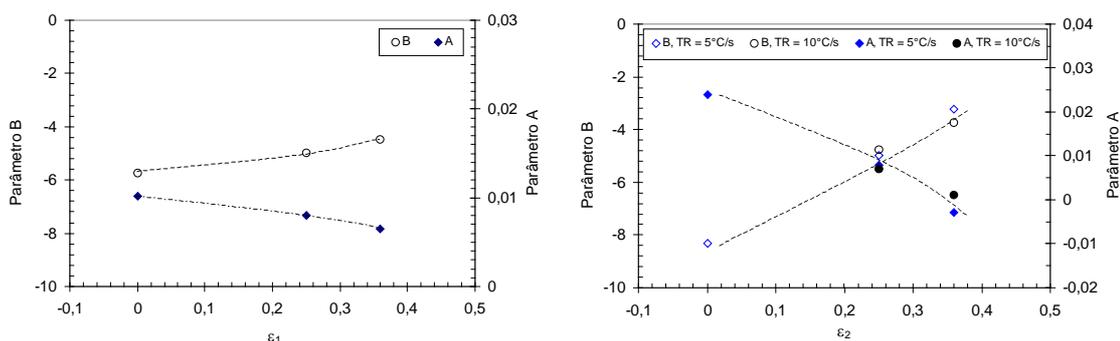


Figura 10.24 - Efeitos de ε_1 e ε_2 nos parâmetros A e B do modelo de cinética de transformação do aço I-47Nb.

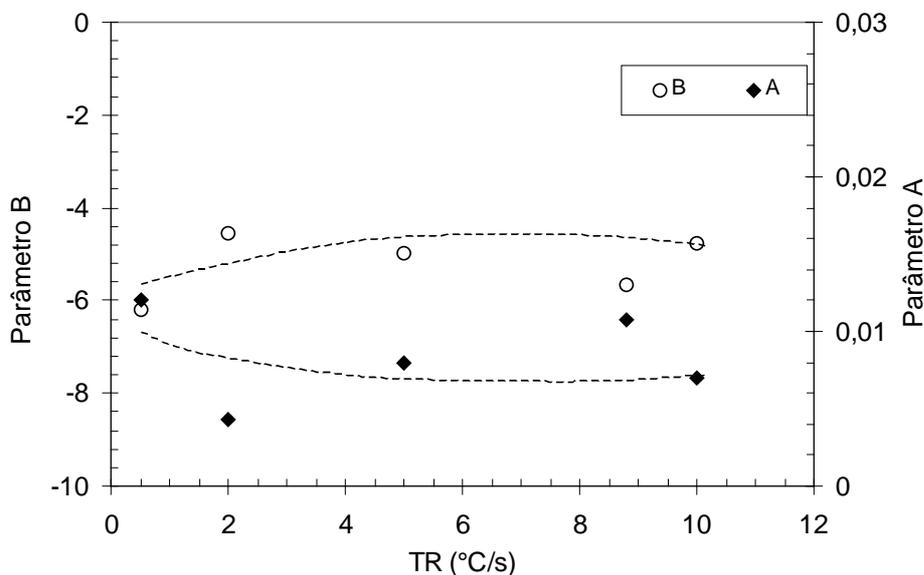


Figura 10.25 - Efeito de TR nos parâmetros A e B do modelo de cinética de transformação do aço I-47Nb.

Gráficos dos parâmetros A e B em função da temperatura de bobinamento do aço I-47Nb são mostrados na Figura 10.26. Existe uma tendência clara de aumento do valor numérico de B com a temperatura de bobinamento. Essa tendência foi observada também para os outros aços investigados. Quando o objetivo é descrever matematicamente o efeito de T_b na cinética de transformação, no entanto, não fica claro um tipo de relacionamento sistemático, em todos os níveis das outras variáveis. Então não foi descoberta, por meios analíticos usuais de regressão estatística, uma expressão matemática com aderência satisfatória aos resultados experimentais.

De uma forma geral, a elevação da temperatura de transformação causa aumento do valor numérico de B e, por conseqüência também do valor numérico de Q_R .

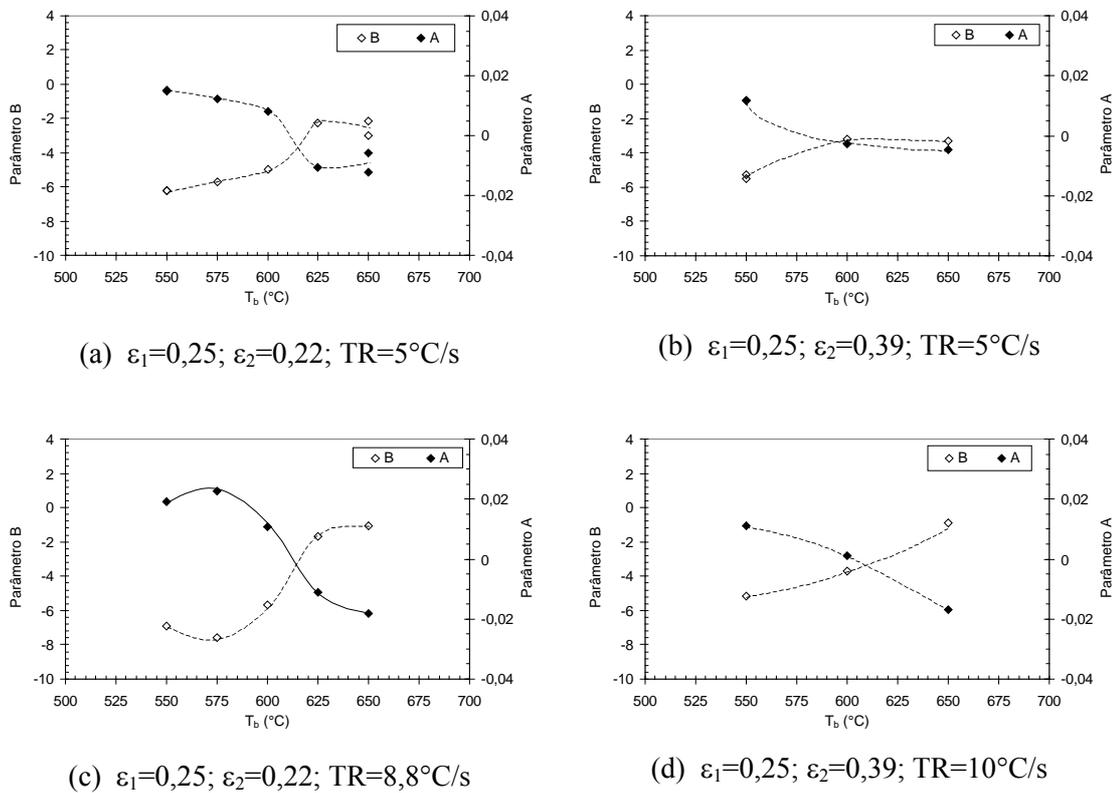


Figura 10.26 - Efeito de T_b nos parâmetros A e B do modelo de cinética de transformação do aço I-47Nb.

Finalmente, foram comparados os valores de B para os quatro aços estudados em função da temperatura de bobinamento, Figura 10.27. Não se observa, novamente, efeito sistemático do Nb no parâmetro B. Porém, fica clara a tendência de o aço processado industrialmente, I-47Nb, ter maiores valores de B em temperaturas de bobinamento mais elevadas. Se B é maior, também será o valor numérico de Q_R . Se este último parâmetro representa alguma energia ou barreira para a transformação, significa que a cinética tenderia a ser mais lenta. Realmente, isto foi observado, conforme conclusões apresentadas no item 3.2.8 e Figura 10.17, onde a tempo de transformação do aço I-47Nb tendeu a superar o dos demais, especialmente em bobinações mais elevadas.

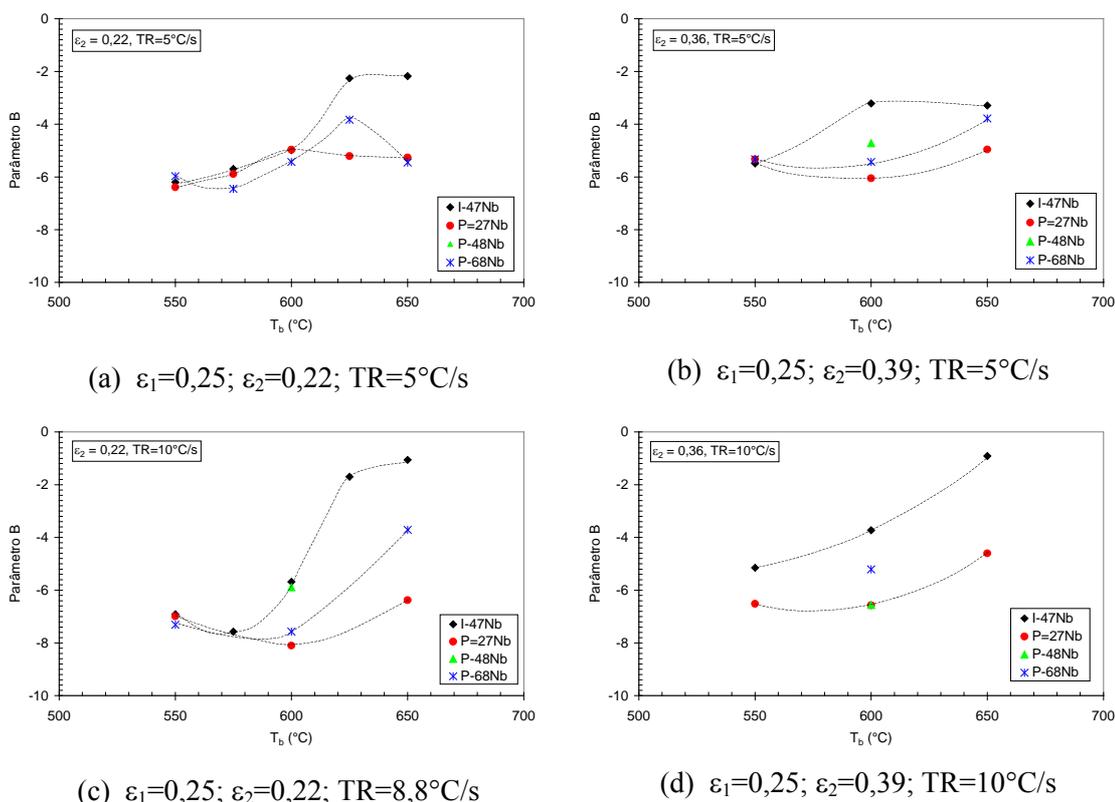


Figura 10.27 - Comparação do parâmetro B para os aços estudados em função da temperatura de bobinamento.

10.3.4. Previsão do parâmetro B do modelo da cinética de transformação

Dado que não foi possível expressar os parâmetros B ou A em função das variáveis de processo por meios analíticos, lançou-se mão da modelagem pela técnica de Redes Neurais Artificiais (RNA). Foi escolhido o parâmetro B devido à sua maior magnitude.

Foi utilizada uma RNA do tipo MLP (*multi-layer perceptron*) com topografia mostrada na Figura 10.28, sendo as variáveis de entrada ε_1 , ε_2 , TR e T_b . As principais características da rede foram: uma camada intermediária com 4 neurônios, algoritmo de treinamento do tipo *back propagation* e função de ativação sigmoideal. Para treinamento foram usados 75% dos dados, sendo o restante para validação. A rede foi implementada com o *software* Matlab 6.0. Os dados utilizados foram relativos ao aço I-47Nb.

A Tabela 10.7 mostra os pesos obtidos relativos aos parâmetros y_i mostrados na rede.

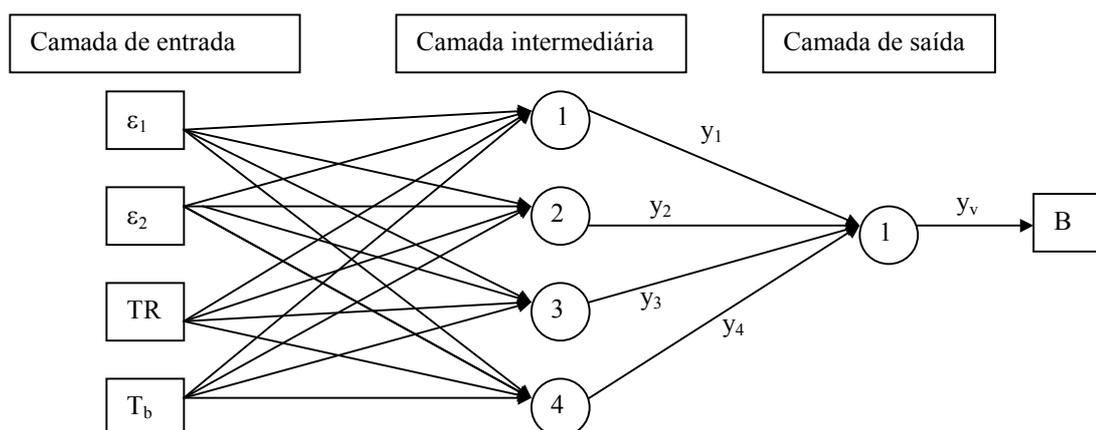


Figura 10.28 - Topografia da rede neural artificial utilizada para modelagem de B.

Tabela 10.7 - Pesos w_{ij} para cálculos dos parâmetros y_i da rede neural.

i	j=1,4				Bias
	1ª Camada para camada intermediária				
1	-0,6128	-3,8133	0,8218	-0,9780	-1,6479
2	0,2412	0,9301	-0,1484	2,7066	-1,0725
3	0,0555	-0,2392	1,0934	-1,8992	1,6753
4	0,8477	-1,0864	0,8889	-0,9350	2,3766
Camada intermediária para camada de saída					Bias
	-0,5482	1,0976	0,9741	0,3502	-0,8580

A Tabela 10.8 mostra as condições dos ensaios sobre os quais foi ajustada a rede, juntamente com os valores de B determinados originalmente no ajuste das curvas de transformação (Tabela 10.1) e os resultados recalculados pela rede. Ressalta-se que os valores de ε_1 , ε_2 e TR nesta tabela foram os reais obtidos nos ensaios, visando a melhor resposta da rede. Observa-se que, em geral, houve satisfatória aproximação entre os valores determinados de B e do recálculo. O desvio padrão e o coeficiente de aderência dos dados, r^2 , foram de 0,52 e 0,93, respectivamente.

Na Figura 10.29 é mostrada em forma de gráfico a aderência do modelo de rede neural aos resultados de B originais. Em toda faixa de valores, obteve-se uma aproximação satisfatória.

Tabela 10.8 - Parâmetro B determinado originalmente e recálculo pela RNA para os ensaios com o aço I-47Nb.

Ensaio	ε_1	ε_2	TR (°C/s)	T_b (°C)	B	
					Original	Recálculo
160	0,23	0,01	5	605	-8,32	-8,41
158	0,24	0,23	2	600	-4,55	-6,04
157	0,22	0,39	10	650	-0,91	-1,17
156	0,22	0,39	10	550	-5,15	-5,43
153	0,22	0,39	10	600	-3,73	-3,57
149	0,22	0,38	5	550	-5,49	-5,40
136	0,24	0,24	5	600	-4,99	-4,87
135	0,23	0,23	5	600	-5,25	-5,01
125	0,26	0,24	10	600	-4,75	-5,26
120	0,24	0,23	5	575	-5,69	-5,75
117	0,24	0,22	5	625	-2,26	-2,40
113	0,35	0,24	5	600	-4,49	-4,44
112	0,01	0,5	5	600	-5,15	-4,29
107	0,01	0,22	5	600	-5,73	-6,34
106	0,01	0,22	5	600	-6,2	-6,34
84	0,23	0,35	8,2	600	-3,95	-3,81
72	0,25	0,37	5	550	-5,28	-5,39
71	0,25	0,37	5	650	-3,29	-3,05
69	0,24	0,38	5	600	-3,21	-3,54
67	0,27	0,22	7,8	550	-6,91	-7,21
66	0,28	0,23	8,4	650	-1,06	-1,32
65	0,23	0,21	8,8	575	-7,57	-7,21
64	0,27	0,23	2	600	-7,57	-5,90
62	0,28	0,23	8,9	625	-1,7	-1,70
61	0,25	0,22	8,8	600	-5,68	-5,47
59	0,26	0,22	5	550	-6,2	-6,35
58	0,27	0,22	5	650	-2,18	-2,70
43	0,25	0,22	5	550	-6,22	-6,40
41	0,26	0,22	5	650	-2,99	-2,72

O modelo de rede neural apresentado tem como uma das entradas a deformação acima de T_{nr} . Frequentemente, nos modelos de evolução microestrutural emprega-se o tamanho de grão austenítico recristalizado, ao invés dessa deformação. Daí, foi desenvolvida uma RNA alternativa, na qual a variável de entrada ε_1 foi substituída pelo tamanho de grão, 59, 48 e 40 μm , respectivamente para deformação nula, de 0,25 e 0,36. A qualidade do ajuste foi pior que no caso da entrada com ε_1 , sendo o erro padrão e o coeficiente de aderência r^2 , respectivamente de 0,76 e 0,86. A Tabela 10.9 mostra os pesos da rede obtida.

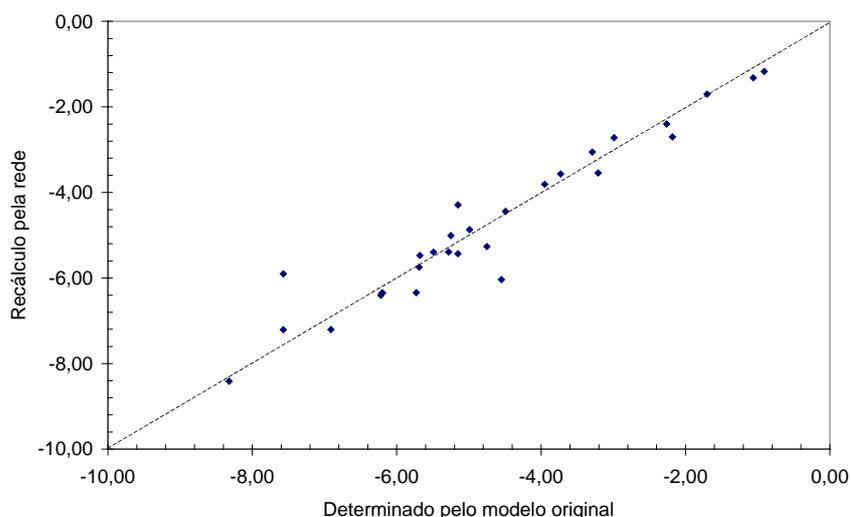


Figura 10.29 - Comparação entre valores de B originais e calculados pela rede neural.

Tabela 10.9 - Pesos w_{ij} para cálculos dos parâmetros y_i da rede neural, considerando o tamanho de grão austenítico como dado de entrada.

i	j=1,4				Bias
	1º Camada para camada intermediária				
1	0,8978	-0,8592	0,1821	2,0603	-0,7196
2	-0,5689	-2,9337	3,1923	0,1069	-1,6226
3	-0,6273	1,9460	1,2634	-0,8647	-0,7732
4	-0,2386	0,6302	1,9918	2,5917	-2,8577
Camada intermediária para camada de saída					Bias
	0,1910	0,0333	-0,5518	1,1184	0,7111

Com a modelagem de B pelo ajuste de RNA e dispondo-se da equação empírica (10.5) entre A e B, fica estabelecido o modelo da cinética de transformação. B é calculado em função das variáveis de processo e A em função de B. Como exemplo de aplicação deste modelo são mostrados dois gráficos das curvas de transformação na Figura 10.30. Foram selecionados os dois relativos à Figura 10.18, sendo um na condição base (ensaio 136, Tabela 10.8) e outro com mesmas deformações e taxa de resfriamento deste, porém sem o bobinamento. Dado que a aplicação do modelo de RNA requer a entrada do valor de T_b foi atribuído o menor valor, 550°C, para este ensaio. A observação visual das curvas da cinética para esses ensaios indica que a aproximação entre elas foi elevada o suficiente para atender ao objetivo do modelamento da cinética global. É interessante,

também, que mesmo a cinética de transformação sem o bobinamento foi bem simulada, considerando-se uma temperatura de bobinamento fictícia, que foi a mais baixa dentro da faixa experimental.

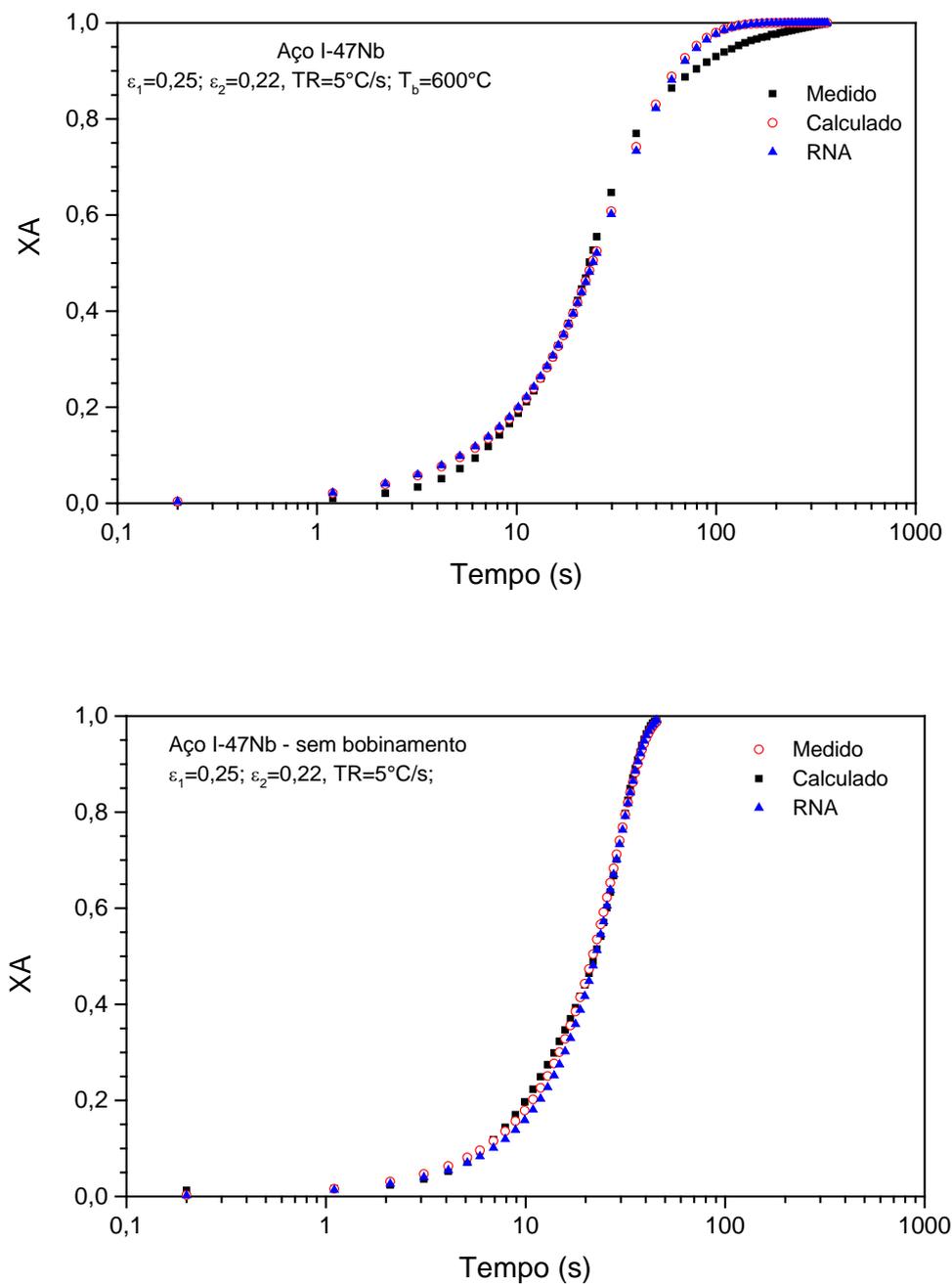


Figura 10.30 - Exemplos de curvas de transformação da austenita medidas, calculadas pela formulação de Avrami e regra da aditividade, e recalculadas pelo modelo desenvolvido.

Concluídos os modelamentos da temperatura de início de transformação (Capítulo 8) e da cinética de transformação, a próxima etapa é a previsão das fases formadas e sua proporção na microestrutura final, o que é objetivo do próximo item.

10.4. Previsão dos Constituintes Formados

10.4.1. Constituintes formados

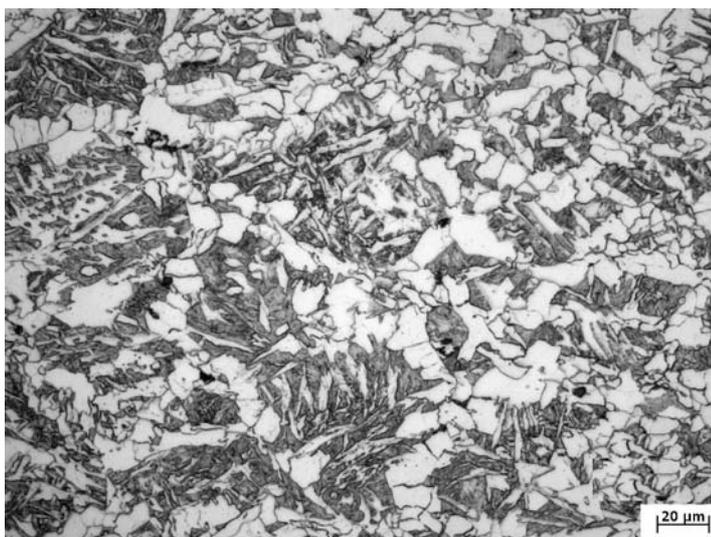
A análise das microestruturas formadas foi mostrada no Capítulo 9, enfatizando o tipo mas não a quantidade de cada constituinte. Foi destacada a formação de ferrita poligonal, perlita e de constituinte acicular. O objetivo do presente item é desenvolver formulações para prever a quantidade desses constituintes em função das condições de processo.

Assim, numa primeira etapa, procurou-se desenvolver um procedimento para prever a fração de ferrita poligonal na microestrutura por meio do enriquecimento em C da austenita. A interpretação da microestrutura é que estaria formando ferrita poligonal, perlita e constituinte de baixa temperatura, nesta ordem. Entretanto, as frações medidas de ferrita poligonal foram baixas, o que levaria, teoricamente, ao início de formação de perlita com a austenita ainda muito pobre em C. Por isso, não se obteve sucesso nas formulações matemáticas.

Análises da microestrutura em corpos-de-prova onde a transformação foi interrompida por resfriamento rápido em temperaturas próximas à de início de formação da perlita, mostraram que, antes deste início, microestruturas aciculares eram formadas, como se observa na Figura 10.31. As microestruturas mostradas referem-se a ensaios com os aços I-47Nb e P-48Nb, onde a transformação para ferrita/perlita foi interrompida a 598°C. As regiões escuras correspondem à martensita formada no resfriamento rápido. Nota-se que a quantidade de ferrita formado no aço P-48Nb é maior que no aço I-47Nb, o que é consequência de sua A_{r3} mais elevada, 717°C contra 709°C, para a condição do ensaio $\varepsilon_1=0,25$; $\varepsilon_2=0,22$; $TR=5^\circ\text{C/s}$ (compare Tabelas 8.3 e 8.4).

Considerando-se esses resultados e as análises das microestruturas finais de todos os ensaios, concluiu-se que a microestrutura final foi constituída de ferrita (incluindo a

poligonal e a estrutura acicular) e perlita, sendo toda a ferrita formada antes da perlita. Vale ressaltar que análises quantitativas da microestrutura com reagente metabissulfato de sódio mostraram a presença de martensita em frações de até 0,03. Considerando-se a dispersão das análises metalográficas e a precisão dos modelos desenvolvidos, a inclusão ou não de frações tão baixas no modelo geral seria irrelevante. Portanto, somente a ferrita total e a perlita foram consideradas nas análises.



(a) I-47Nb



(b) P-48Nb

Figura 10.31 - Microestruturas dos aços I-47Nb e P-48Nb após resfriamento lento interrompido por têmpera a 598°C. Ensaios na condição base.

Devido à maior representatividade e interesse, somente os ensaios relativos ao aço I-47Nb foram submetidos à análise a seguir.

Para a determinação das frações de perlita e ferrita foram realizados procedimentos padrão de preparação metalográfica, e a superfície foi atacada com uma solução de ácido pícrico 4% em álcool, de forma a revelar somente a perlita. A Figura 10.32 mostra, como exemplo, a microestrutura assim observada para três ensaios nos quais $\varepsilon_1=0,25$, $\varepsilon_2=0,22$, $T_b = 600^\circ\text{C}$ e TR variou entre 2 e 10°C/s . Para efeito de comparação também são mostradas as microestruturas visualizadas com o ataque nital 4%, onde se destacam os contornos de grão ferríticos. Observe que estes ensaios correspondem àqueles mostrados na Figura 9.4.

Ajustando-se o contraste no analisador de imagens Zeiss Axiovision, de forma que a perlita fosse diferenciada da ferrita (isto é, alguma outra segunda fase ficou incorporada na perlita), foi feita a determinação automática varrendo-se 32 campos na região aproximadamente no meio do comprimento do corpo-de-prova.

As frações de ferrita determinadas são mostradas na Tabela 10.10. São mostrados os valores de ferrita total, na coluna “F e P” e, como complementação, a ferrita poligonal, na coluna “Pol”, determinada pela contagem de interceptos após ataque com nital 4%. Observa-se que a fração de ferrita poligonal é inferior à total. Na antepenúltima coluna é mostrado o valor de ferrita calculado, o qual será discutido a seguir. Também são mostradas nessa tabela as condições reais dos ensaios relativos às microestruturas analisadas.

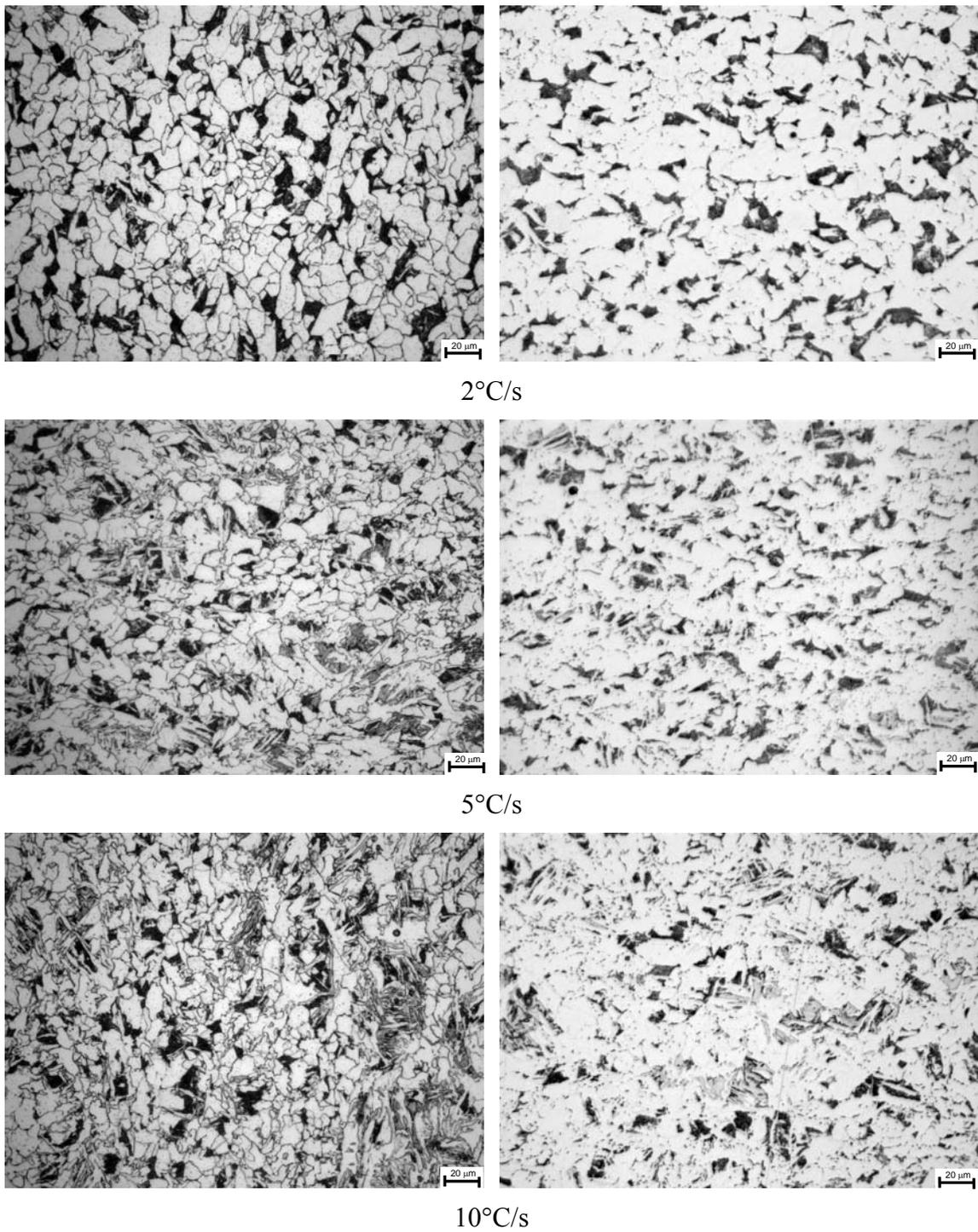


Figura 10.32 - Exemplos de microestrutura visualizadas após ataques com nital 4% (à esquerda) e solução de ácido pícrico (à direita) em corpos-de-prova do aço I-47Nb.

Tabela 10.10 - Frações de ferrita determinadas por análises quantitativas.

Ensaio	ϵ_1	ϵ_2	T_e (°C)	TR (°C/s)	T_b (°C)	TR ₂ (°C/s)	T_f (°C)	Δt (s)	Ar3 (°C)	Arf (°C)	XF calc.	XF medido	
												F e P	Fer. Pol.
160	0,23	0	880	5	605	0,063	580	400	669	576	0,779	0,635	0,534
158	0,24	0,23	880	2	600	0,05	580	400	729	587	0,783	0,811	NR
157	0,22	0,39	880	10	650	0,05	630	400	700	623	0,743	0,781	0,664
156	0,22	0,39	880	10	550	0,05	530	704	545	564	0,782	0,723	0,546
136	0,24	0,24	840	5	600	0,05	580	400	708	577	0,787	0,687	0,514
135	0,23	0,23	920	5	600	0,05	580	400	705	579	0,778	0,775	0,586
125	0,26	0,24	880	10	600	0,05	580	400	688	577	0,746	0,645	0,517
120	0,24	0,23	880	5	575	0,05	555	400	703	565	0,801	0,703	0,496
117	0,24	0,22	880	5	625	0,05	605	400	707	589	0,781	0,758	0,718
113	0,35	0,24	880	5	600	0,05	580	400	715	585	0,785	0,763	0,630
112	0	0,5	880	5	600	0,05	580	400	717	590	0,774	0,794	0,622
107	0	0,22	880	5	600	0,05	580	400	694	570	0,824	0,713	0,635
105	0,23	0,21	880	0,5	600	0,05	580	400	748	590	0,783	0,787	NR
84	0,23	0,35	880	8,2	600	0,05	582	360	720	569	0,753	0,681	0,703
72	0,25	0,37	880	5	550	0,05	532	360	719	544	0,753	0,735	0,561
71	0,25	0,37	880	5	650	0,05	632	360	725	627	0,812	0,732	0,732
69	0,24	0,38	880	5	600	0,05	582	360	709	569	0,780	0,766	0,718
67	0,27	0,22	880	7,8	550	0,05	532	360	693	540	0,686	0,693	0,509
66	0,28	0,23	880	8,4	650	0,05	526	480	701	618	0,810	0,741	0,753
65	0,23	0,21	880	8,8	575	0,05	557	360	684	553	0,718	0,601	0,502
64	0,27	0,23	880	2	600	0,05	582	360	718	580	0,755	0,739	0,703
62	0,28	0,23	880	8,9	625	0,05	607	360	690	601	0,803	0,762	0,670
61	0,25	0,22	880	8,8	600	0,05	582	360	685	575	0,776	0,668	0,626
59	0,26	0,22	880	5	550	0,05	532	360	708	541	0,744	0,539	0,441
58	0,27	0,22	880	5	650	0,05	626	480	707	618	0,816	0,766	0,765
54	0,27	0,23	880	5	600	0,05	582	360	700	528	0,778	0,647	0,668
43	0,25	0,22	880	5	550	0,5	450	200	714	523	0,753	0,605	0,574
41	0,26	0,22	880	5	650	0,5	470	360	710	498	0,795	0,769	0,758
33	0,25	0,21	880	5	600	0,5	450	300	715	501	0,761	0,725	0,639

NR: não realizado

10.4.2. Modelo de previsão da fração de ferrita total e de segunda fase

Na literatura encontram-se referências sobre o critério de início de formação da perlita em modelos seqüenciais de formação de fases/constituintes^{61,80-84,86,115,132}. Este critério, cuja idéia é atribuída a Hultgren¹³¹, estabelece que a formação da perlita se inicia quando o teor de C na austenita enriquecida atinge a linha A_{cm} extrapolada para temperaturas abaixo da linha Ae_1 . Todavia, em nenhum destes trabalhos são mostradas formulações e/ou resultados de cálculos realizados pelos autores. Em trabalho anterior do presente autor¹⁶ foi aplicado o conceito acima ao modelamento da transformação da austenita em aços CMn. Houve razoável concordância entre os valores experimentais de fração de ferrita e perlita com a sua previsão.

Partiu-se, então, para aplicação deste método aos aços estudados. Todos os ensaios foram submetidos a esta análise. Para isso foi desenvolvido um programa de

computador cujos dados de entrada incluem as matrizes temperatura/tempo e fração transformada total, ou seja, a cinética de transformação. Utilizando-se os cálculos termodinâmicos mostrados no Capítulo 4, de acordo com a base de dados de Kirkaldy et al.^{48,52}, e a cinética de transformação, calculou-se o enriquecimento em C da austenita e o momento em que o teor de C atingiu a A_{cm} . A fração transformada até este momento é o valor dado na coluna XF calculado na Tabela 10.10.

A Figura 10.33 mostra o diagrama de enriquecimento da austenita calculado para o ensaio na condição base (ensaio 135). As linhas de equilíbrio mostradas são válidas para todos os aços estudados uma vez que elas somente dependem da composição química, e esta não teve variação significativa, a menos do Nb, o qual não é considerado no cálculo do diagrama.

No modelamento da cinética de transformação e das frações das fases finais objetiva-se prever, entre outras variáveis, a temperatura de início de formação da perlita, A_{rpi} . O momento deste evento nos ensaios realizados coincidiu com a faixa de resfriamento lento, ou seja uma condição quase isotérmica. Assim, existe, evidentemente, variação significativa da fração transformada para pequenas quedas na temperatura. Isto inviabilizou a opção de modelamento da A_{rpi} neste trabalho, pois não existe possibilidade de algum modelo prever, com suficiente precisão, uma temperatura de início de formação de fases, onde as variações de frações de graus Celsius implicam em grandes variações da fração transformada. Assim, passou-se a conduzir uma análise voltada apenas para o modelamento da fração final de ferrita formada, XF.

Na Figura 10.34 é mostrado o gráfico da fração formada de ferrita calculada pelo procedimento acima em função do valor medido na análise quantitativa da ferrita total, doravante sendo sempre essa a fração considerada de ferrita. Verifica-se que existe considerável dispersão dos resultados e que o valor calculado tende a subestimar o medido. Concluiu-se, então, que o método, da forma concebida originalmente, não foi satisfatório.

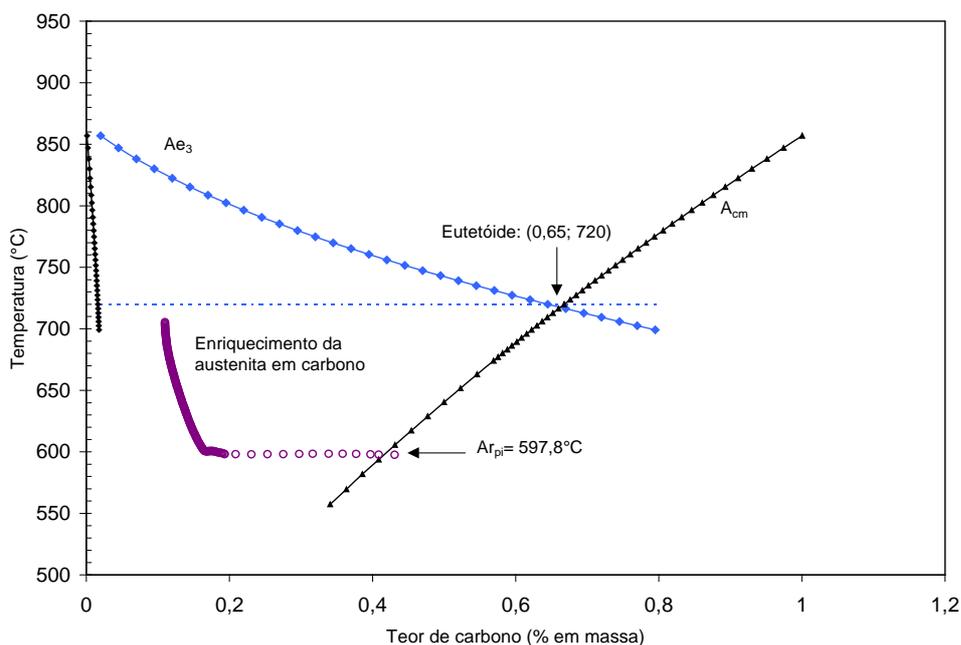


Figura 10.33 - Diagrama de enriquecimento em C da austenita durante o ensaio na condição base do aço I-47Nb.

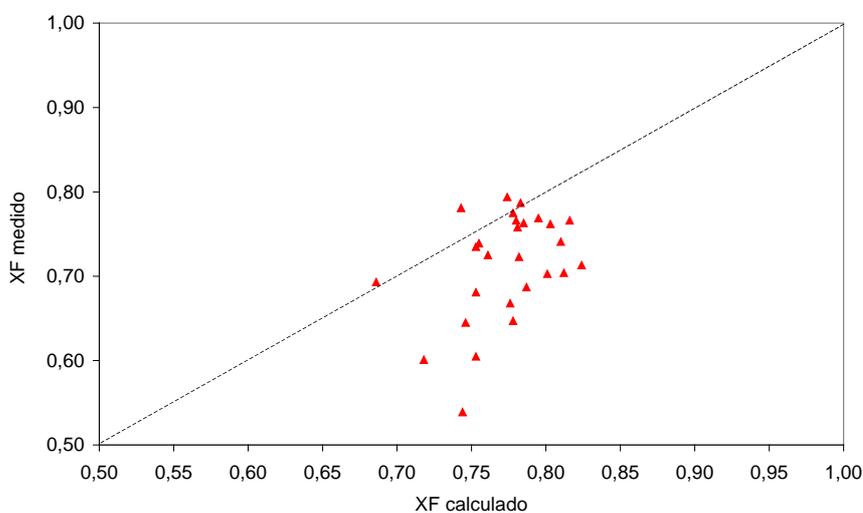


Figura 10.34 - Frações de ferrita medida versus calculada a partir de linhas de equilíbrio de Kirkaldy.

A interpretação, a princípio, para a diferença encontrada é que a ferrita foi formada em temperaturas relativamente baixas, além de não apresentar somente a forma poligonal clássica. Aliás, mesmo a ferrita chamada poligonal neste estudo não possui contornos, visto nas metalografias, perfeitamente poligonais, como encontrado nas microestruturas

tradicionais ferrita/perlita em aços CMn comuns. Então, nos ensaios realizados, não teria havido condições para satisfazer o conceito de *mean field*, que foi utilizado nos cálculos computacionais para determinação da fração formada de ferrita.

O conceito de *mean field*, bastante citado na literatura^{59,80}, é traduzido pela equação (3.39) e significa que o C difundido a partir da interface de transformação fica com concentração equalizada, imediatamente, em toda a austenita restante. Evidentemente, ao final da transformação isto não é válido. Nas microestruturas típicas e bem definidas, formadas normalmente em temperaturas mais altas em aços CMn, é provável que haja suficiente mobilidade do C para que a austenita seja enriquecida de forma relativamente uniforme, satisfazendo este critério, como aplicado em outro estudo¹⁶.

Foram realizadas diversas análises buscando relacionar as frações calculadas e medidas e encontrar uma formulação que justificasse a diferença encontrada, incluindo-se cálculos de difusão do C na austenita. Numa destas análises foi determinado o teor de C na austenita enriquecida no momento que a fração transformada XA atingiu o valor de XF medido (C γ em XF medido). Os resultados obtidos são mostrados na Tabela 10.11. Na última coluna desta tabela é mostrada a diferença entre C γ em XF calculado pelo enriquecimento e C γ em XF medido.

O gráfico desta diferença em função do teor de C na austenita no momento que a fração transformada atinge XF medido, agrupando-se os dados em função da temperatura de bobinamento, é mostrado na Figura 10.35. Observa-se uma relação linear consistente para as temperaturas de bobinamento maiores ou iguais a 600°C. Isto significa que a perlita, nos aços estudados, iniciou a formação quando o teor de carbono na austenita era inferior ao calculado pela linha A_{cm} calculada segundo Kirkaldy et al.^{48,52}, cuja formulação traduz o equilíbrio pleno (ortoequilíbrio). Além disso, a diferença de teor de C entre o previsto e o obtido foi descrita com precisão elevada por uma reta. Na verdade, o teor de C em XF calculado é praticamente constante para uma dada temperatura de bobinamento, como mostra a Tabela 10.11, e é este fato que leva à linearidade observada. Embora o gráfico da Figura 10.35 seja bastante interessante e ilustrativo, as regressões lineares apresentadas não podem ser aproveitadas para fins de

modelamento da fração formada de ferrita, pois os termos de ambos, abscissa e ordenada, são dependentes. Isto implica em uma equação com duas incógnitas.

Tabela 10.11 - Teor de C na austenita no momento em que a fração transformada de austenita atinge os valores medido e calculado de ferrita.

Ensaio	ϵ_1 (m/mm)	ϵ_2 (mm/mm)	TR (°C/s)	T_b (°C)	XF med.	XF calc.	C_γ (%)		ΔC_γ (%)
							XF med.	XF cal.	
160	0,23	0	5	605	0,635	0,779	0,257	0,405	0,148
158	0,24	0,23	2	600	0,811	0,783	0,471	0,417	-0,054
157	0,22	0,39	10	650	0,781	0,743	0,424	0,509	0,085
156	0,22	0,39	10	550	0,723	0,782	0,322	0,355	0,033
136	0,24	0,24	5	600	0,687	0,787	0,295	0,417	0,122
135	0,23	0,23	5	600	0,775	0,778	0,399	0,416	0,017
125	0,26	0,24	10	600	0,645	0,746	0,263	0,416	0,153
120	0,24	0,23	5	575	0,703	0,801	0,304	0,371	0,067
117	0,24	0,22	5	625	0,758	0,781	0,379	0,457	0,078
113	0,35	0,24	5	600	0,763	0,785	0,381	0,417	0,036
112	0	0,50	5	600	0,794	0,774	0,435	0,417	-0,018
107	0	0,22	5	600	0,713	0,824	0,318	0,415	0,097
105	0,23	0,21	0,5	600	0,787	0,783	0,442	0,536	0,094
84	0,23	0,35	8,2	600	0,681	0,753	0,290	0,418	0,128
72	0,25	0,37	5	550	0,735	0,753	0,338	0,365	0,027
71	0,25	0,37	5	650	0,704	0,812	0,320	0,508	0,188
69	0,24	0,38	5	600	0,766	0,780	0,385	0,416	0,031
67	0,27	0,22	7,8	550	0,693	0,686	0,292	0,333	0,041
66	0,28	0,23	8,4	650	0,741	0,810	0,362	0,505	0,143
65	0,23	0,21	8,8	575	0,601	0,718	0,234	0,395	0,161
64	0,27	0,23	2	600	0,739	0,755	0,342	0,417	0,075
62	0,28	0,23	8,9	625	0,762	0,803	0,382	0,461	0,079
61	0,25	0,22	8,8	600	0,668	0,776	0,280	0,416	0,136
59	0,26	0,22	5	550	0,539	0,744	0,207	0,346	0,139
58	0,27	0,22	5	650	0,766	0,816	0,398	0,505	0,107
54	0,27	0,23	5	600	0,647	0,778	0,264	0,402	0,138
43	0,25	0,22	5	550	0,605	0,753	0,237	0,361	0,124
41	0,26	0,22	5	650	0,769	0,795	0,394	0,441	0,047
33	0,25	0,21	5	600	0,725	0,761	0,329	0,388	0,059

Então, partiu-se para o cálculo da linha A_{cm} segundo a condição de paraequilíbrio com a base de dados de Miettinen⁶⁵. A Figura 10.36 ilustra a região do diagrama Fe-C relativa à transformação de fases dos aços estudados, incluindo as linhas A_{cm} calculadas para as condições de ortoequilíbrio (Kirkaldy et al^{48,52}), e paraequilíbrio, tendo sido esta última calculada apenas no intervalo de interesse para este trabalho, de 700°C a 500°C. É mostrada também a curva de enriquecimento da austenita para o ensaio 135 citado anteriormente. O teor de C atinge a linha A_{cm} em paraequilíbrio antes que a de

ortoequilíbrio. Como o resfriamento do corpo-de-prova é muito lento a temperatura Ar_{pi} praticamente não é alterada, mas a fração formada de ferrita calculada é reduzida de 0,778 para 0,734.

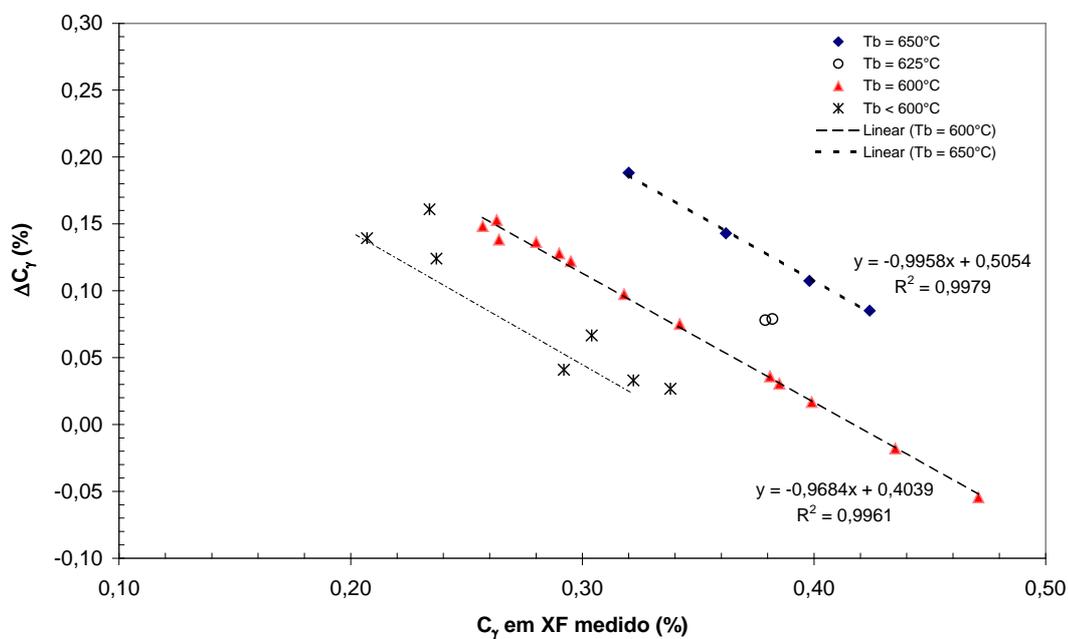


Figura 10.35 - Diferença do teor de C na austenita calculado para atingimento da linha A_{cm} por Kirkaldy e no momento de término de formação de ferrita.

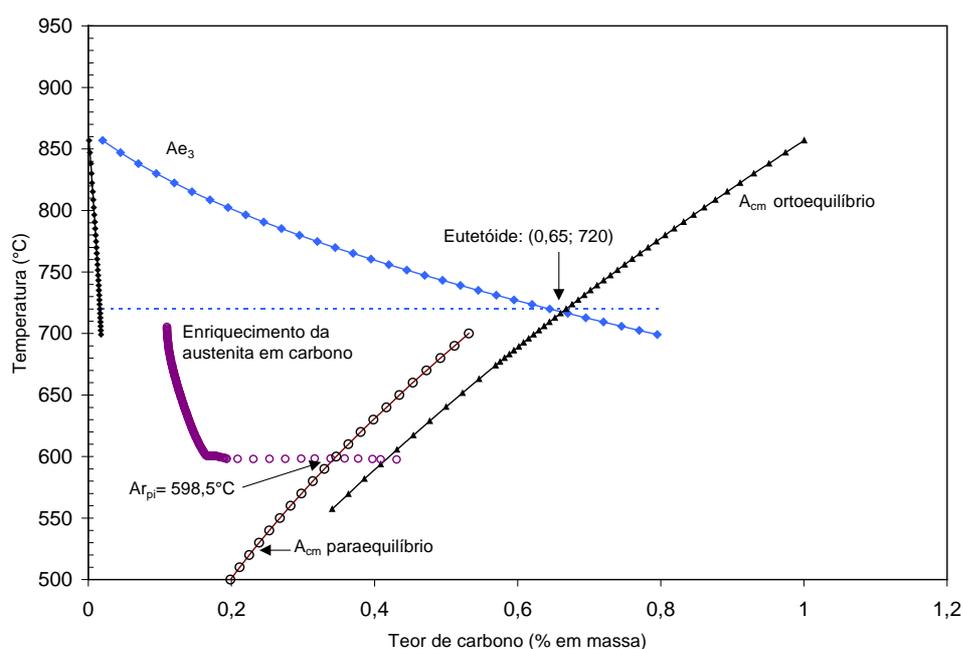


Figura 10.36 - Diagrama de enriquecimento em C da austenita durante o ensaio na condição base do aço I-47Nb, com as linhas A_{cm} de orto e paraequilíbrio.

Foi então aplicado o procedimento de cálculo da fração formada de ferrita total considerando a linha A_{cm} de paraequilíbrio para todos os ensaios com o aço I-47Nb. Como havia alguns ensaios repetidos em mesmas condições, foram feitos valores médios dos resultados nestes casos. A Tabela 10.12 mostra os valores de fração de ferrita medida total e calculada. Os valores calculados situaram-se na faixa de 0,68 a 0,80, enquanto que os medidos situaram-se entre 0,60 e 0,81, portanto, em faixa mais ampla. Nota-se que, em geral, existe uma razoável aproximação entre valores medidos e calculados, exceto quando os medidos ficam abaixo de 0,68. Nesta última condição, a microestrutura torna-se mais complexa e é maior a quantidade de constituinte acicular, o que leva a maior imprecisão na determinação das porcentagens de fases.

Tabela 10.12 - Frações medida e calculada de ferrita formada em função de diferentes condições de ensaio, cálculos com A_{cm} de paraequilíbrio.

ε_1	ε_2	TR (°C/s)	T_b (°C)	XF med.	XF _{para} calc.
0,25	0,22	5	650	0,768	0,769
0,25	0,22	5	625	0,758	0,760
0,25	0,22	5	600	0,729	0,730
0,25	0,22	5	575	0,703	0,704
0,25	0,22	5	550	0,572	0,699
0,25	0,22	10	650	0,741	0,781
0,25	0,22	10	625	0,762	0,761
0,25	0,22	10	600	0,657	0,735
0,25	0,22	10	575	0,601	0,700
0,25	0,36	5	650	0,734	0,782
0,25	0,36	5	600	0,766	0,734
0,25	0,36	5	550	0,735	0,710
0,25	0,36	10	650	0,781	0,783
0,25	0,36	10	600	0,681	0,736
0,25	0,36	10	550	0,723	0,699
0,25	0	5	605	0,635	0,741
0,25	0,22	2	600	0,811	0,747
0,36	0,22	5	600	0,763	0,736
0	0,50	5	600	0,794	0,734
0	0,22	5	600	0,713	0,735
0,25	0,22	0,5	600	0,787	0,797
0,25	0,2	2	600	0,739	0,736
0,25	0,22	7,8	550	0,693	0,680

Considerando-se os erros inerentes ao método quantitativo de análises dos constituintes nos aços em estudo, especialmente por causa da microestrutura relativamente complexa, pode-se dizer que o procedimento de cálculo da fração formada pelo enriquecimento em C da austenita, em condições de paraequilíbrio, é satisfatório.

Diversos estudos de pesquisa têm concluído que realmente a transformação da austenita em aços com adições de elementos de liga tais como o Mn, ocorrem em condições de paraequilíbrio^{13,41-45,62}. Gupta²⁶, por exemplo, concluiu que em transformações abaixo de 740°C, o Mn não se redistribui na austenita, ou seja, prevalece a condição de paraequilíbrio.

Finalmente a Figura 10.37 mostra um gráfico com os valores de XF medidos e calculados pelo modelo proposto para os ensaios considerados. Foram traçadas linhas com variação de $\pm 5\%$ na fração medida, que pode ser considerado um erro usual em análises metalográficas de fases tais como as dos corpos-de-prova ensaiados. A maior parte dos resultados estão dentro dessa faixa.

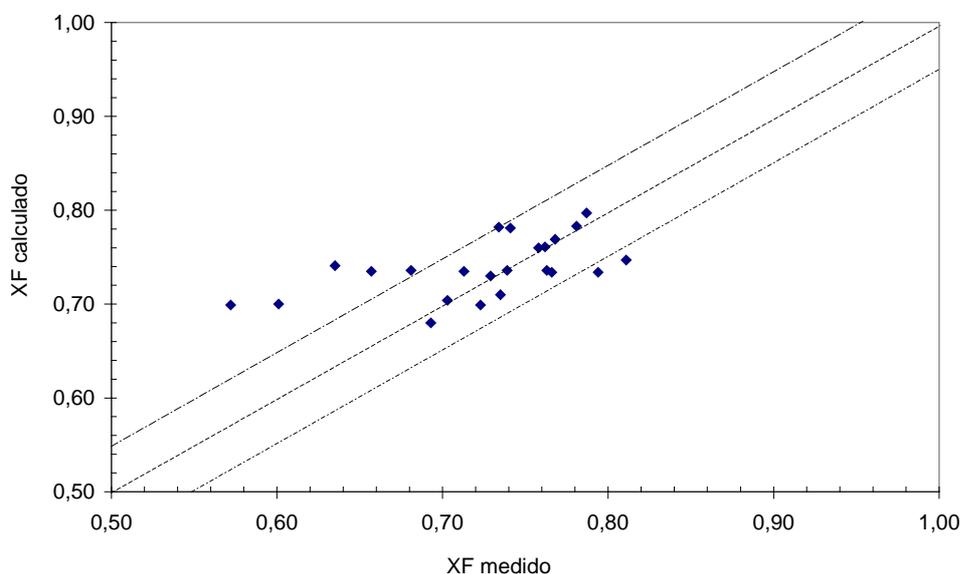


Figura 10.37 - Valores medidos e calculados da fração de ferrita formada nos ensaios com o aço I-47Nb. Cálculos considerando a condição de paraequilíbrio.

10.5. Resumo

Este capítulo representa a parte central deste estudo, onde foi modelada a cinética de decomposição da austenita nos constituintes predominantes, ferrita e perlita.

Para isso, inicialmente foi analisado o efeito sobre a cinética de transformação das variáveis estudadas: deformação acima e abaixo de T_{nr} , taxa de resfriamento e temperatura de bobinamento. De uma forma geral, temperaturas mais baixas de transformação, favorecidas por menores deformações e temperaturas de bobinamento ou maiores taxas de resfriamento, resultam em maiores taxas de transformação. Não foi observado efeito significativo e sistemático do Nb, nos aços estudados, na cinética de transformação. Com relação à rota de processamento, houve tendência do aço processado em escala industrial apresentar taxas de transformação ligeiramente inferiores à dos aços processados em escala piloto.

A cinética de transformação global da austenita foi então modelada pela equação de Avrami, com o expoente $n = 1$, conjugada com a aplicação da regra da aditividade. O parâmetro b desta equação foi descrito como uma função exponencial da temperatura, empregando-se duas constantes denominadas A e B . Foi verificado que tais constantes estão relacionadas, de forma que apenas uma delas precisou ser modelada em função das variáveis de processo. Não foi encontrada uma formulação analítica precisa o suficiente para prever a constante escolhida B , mas o emprego de uma rede neural artificial permitiu atingir tal objetivo. Com isso, a rede neural é utilizada para prever o valor de B e, pela relação entre as variáveis, calcula-se A . Mostrou-se que existe uma relação matemática entre A e B e as constantes utilizadas quando o parâmetro b é calculado por uma expressão do tipo Arrhenius.

Finalmente, foram desenvolvidos procedimentos para cálculo da fração formada de ferrita, e conseqüentemente da segunda fase, a perlita no caso, dos aços estudados. Neste procedimento, calcula-se o enriquecimento em C da austenita e quando o teor de C atinge a linha A_{cm} , calculada em paraequilíbrio e extrapolada abaixo de A_{e1} , inicia-se a formação de perlita. A precisão do cálculo de frações formadas foi considerada satisfatória, na maioria dos casos dentro de $\pm 5\%$, tendo em vista a complexidade da microestrutura obtida e os erros inerentes à análise microestrutural.

11. APLICAÇÃO DO MODELO AO PROCESSO INDUSTRIAL

Neste capítulo são apresentados os resultados de medidas de dureza dos aços ensaiados em laboratório comparando-os com a dureza obtida na bobina processada industrialmente. Procura-se também evidenciar a influência das variáveis de processo na dureza final. Outro foco deste capítulo é uma previsão preliminar da microestrutura e propriedades finais da tira a partir do modelo de transformação desenvolvido, fazendo-se também a comparação com o resultado industrial.

Na Figura 11.1 é mostrada a microestrutura da bobina processada industrialmente a partir do esboço que originou a amostra do aço I-47Nb. A microestrutura é refinada e constituída de ferrita poligonal e perlita bandeada. Observam-se contornos de grão ferrítico irregulares, de forma similar ao observado nos corpos-de-prova ensaiados. A fração de ferrita foi de 0,761 e o tamanho de grão ferrítico (TGF) de 3,7 μm . Os valores de dureza serão comentados no item seguinte.

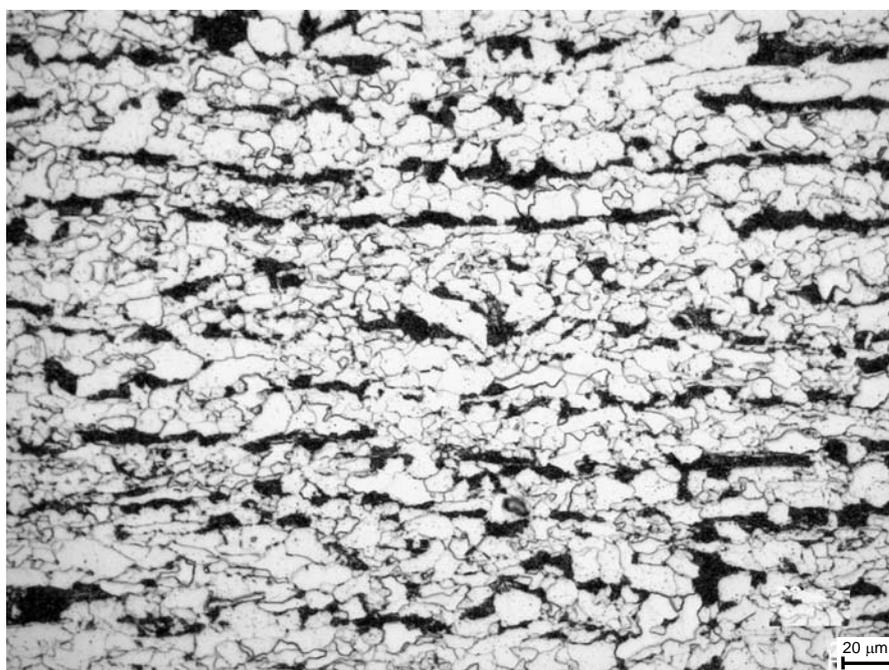


Figura 11.1 - Microestrutura da bobina do aço I-47Nb processado industrialmente. Seção longitudinal, ataque nital 4%.

11.1. Análises de Dureza

O modelo apresentado até aqui permite prever a porcentagem dos constituintes formadas. Se também a dureza de cada constituinte puder ser prevista, e considerando-se ainda que as propriedades mecânicas dependem dessa dureza, obtém-se um subsídio útil para o desenvolvimento de um modelo integrado de previsão de propriedades finais dos aços.

Uma vez que a microestrutura dos aços ensaiados em laboratório apresentou-se complexa, incluindo ferrita acicular, tornaria difícil uma determinação precisa da dureza dos constituintes em todos os corpos-de-prova ensaiados. Então foram selecionados alguns que apresentaram predominantemente ferrita poligonal e perlita para essa determinação.

A Tabela 11.1 mostra os resultados das medições para os ensaios selecionados e para a amostra da bobina industrial. São mostradas também as frações volumétricas dos constituintes. Observa-se que a dureza da ferrita variou entre 163 a 231 HV, sendo que os valores baixos correspondem às menores taxas de resfriamento. Se forem excluídos estes valores, pode-se dizer que a dureza da ferrita situou-se entre 210 e 230 HV, não havendo variação significativa associada às condições de teste. Assim, embora a quantidade de resultados seja pequena, eles sinalizam a inviabilidade do modelamento da dureza da ferrita, pois não se observa efeito significativo das diversas variáveis estudadas. Nota-se também que a dureza da ferrita da amostra industrial foi abaixo da média das durezas das amostras de laboratório.

O efeito da taxa de resfriamento na dureza da ferrita, no entanto, foi marcante. Quanto mais lento o resfriamento mais baixa a dureza, o que é decorrente das temperaturas mais altas de transformação. Um dos fatores para explicar a menor dureza é, certamente, a menor densidade de deslocações da ferrita de alta temperatura³⁶⁻³⁸, mas fatores tais como a precipitação de carbonitreto também é relevante⁹⁷.

A dureza da perlita variou em uma faixa mais ampla, entre 278 e 387 HV, mas esta variação pode ter sido influenciada pelo pequeno tamanho das colônias, de forma que nem sempre a impressão de dureza tenha ficado restrita inteiramente à ela. Os valores

de dureza da martensita são compatíveis com os esperados para o teor de C da austenita nestes aços¹⁸⁹.

Tabela 11.1 - Durezas das fases/constituintes e média do aço I-47Nb processado industrialmente e em laboratório.

ϵ_1	ϵ_2	T_{ϵ_2} (°C)	TR (°C/s)	T_b (°C)	Microdureza HV 10 gf			HV 10 kg	%F	%P	HV 10 gf mistura	Rel. HV
					F	P	M					
		Industrial			223,0	316,6	NR	205,2	0,761	0,239	245,4	1,196
0,23	0,21	880	0,5	600	163,0	306,7	NR	171,0	0,787	0,213	193,6	1,132
0,24	0,23	880	2	600	189,4	337,0	NR	198,2	0,811	0,189	217,3	1,096
0,24	0,24	840	5	600	219,3	322,9	638,8	209,2	0,687	0,313	251,7	1,203
0,23	0,23	920	5	600	217,7	299,1	453,1	211,8	0,775	0,225	236,0	1,114
0,26	0,24	880	10	600	220,9	325,5	532,2	222,6	0,645	0,355	258,1	1,159
0,23	0	880	5	605	220,0	278,1	516,3	230,0	0,635	0,365	241,2	1,049
0,35	0,24	880	5	600	229,9	323,0	530,6	224,2	0,763	0,237	252,0	1,124
0,23	0,35	880	8,2	600	227,5	287,2	545,3	220,6	0,681	0,319	246,5	1,118
0,27	0,22	880	5	650	231,5	346,3	762,2	220,0	0,766	0,234	258,3	1,174
0,26	0,22	880	5	550	214,9	NR	NR	212,4	0,539	0,461	-	-
0,22	0,39	880	10	650	231,5	382,9	583,0	216,2	0,781	0,219	264,6	1,224
0,22	0,39	880	10	600	232,5	333,0	613,9	NR	NR	-	-	-
0,22	0,39	880	10	550	229,7	NR	NR	207,6	0,723	0,277	-	-

NR: não realizado

Na Tabela 11.1 mostra-se ainda a dureza global HV 10 kgf dessas amostras. Foi feito também o cálculo da dureza média ponderando-se as durezas da ferrita e da perlita por suas frações volumétricas. É interessante que a dureza média foi sempre superior, entre 10% e 20%, à dureza global medida, como mostra a última coluna da tabela, que fornece a relação entre tais valores. Se fosse considerada a pequena fração de martensita, a dureza média seria ainda maior. Isso indica que, nos modelos de previsão de propriedades que considerem a regra da mistura para cálculo da dureza média, em função da dureza das fases, um fator de correção pode ser necessário.

Como a análise de dureza dos constituintes não sinalizou a possibilidade de modelamento, foi realizada uma análise da dureza global das amostras ensaiadas. Na Tabela 11.2 são mostrados os resultados para os ensaios com o aço I-47Nb, juntamente com os principais dados de processo.

Tabela 11.2 - Dureza global dos corpos-de-prova ensaiados do aço I-47Nb.

Ensaio	ϵ_1 (m/mm)	ϵ_2 (mm/mm)	T_{ϵ_2} (°C)	TR (°C/s)	T_b (°C)	TR ₂ (°C/s)	T_f (°C)	Ar ₃ (°C)	Ar _f (°C)	HV 10 kgf
160	0,23	0	880	5	605	0,063	580	669	576	230,0
158	0,24	0,23	880	2	600	0,05	580	729	587	198,2
157	0,22	0,39	880	10	650	0,05	630	700	623	216,2
156	0,22	0,39	880	10	550	0,05	530	545	564	207,6
136	0,24	0,24	840	5	600	0,05	580	708	577	209,2
135	0,23	0,23	920	5	600	0,05	580	705	579	211,8
125	0,26	0,24	880	10	600	0,05	580	688	577	222,6
120	0,24	0,23	880	5	575	0,05	555	703	565	207,2
117	0,24	0,22	880	5	625	0,05	605	707	589	215,6
113	0,35	0,24	880	5	600	0,05	580	715	585	224,2
112	0	0,5	880	5	600	0,05	580	717	590	209,4
107	0	0,22	880	5	600	0,05	580	694	570	227,6
105	0,23	0,21	880	0,5	600	0,05	580	748	590	171,0
84	0,23	0,35	880	8,2	600	0,05	582	720	569	220,6
72	0,25	0,37	880	5	550	0,05	532	719	544	206,6
71	0,25	0,37	880	5	650	0,05	632	725	627	207,4
69	0,24	0,38	880	5	600	0,05	582	709	569	207,8
67	0,27	0,22	880	7,8	550	0,05	532	693	540	215,4
66	0,28	0,23	880	8,4	650	0,05	526	701	618	218,0
65	0,23	0,21	880	8,8	575	0,05	557	684	553	225,2
64	0,27	0,23	880	2	600	0,05	582	718	580	201,4
62	0,28	0,23	880	8,9	625	0,05	607	690	601	214,6
61	0,25	0,22	880	8,8	600	0,05	582	685	575	222,4
59	0,26	0,22	880	5	550	0,05	532	708	541	212,4
58	0,27	0,22	880	5	650	0,05	626	707	618	220,0
54	0,27	0,23	880	5	600	0,05	582	700	528	214,4
43	0,25	0,22	880	5	550	0,5	450	714	523	212,4
41	0,26	0,22	880	5	650	0,5	470	710	498	210,8
33	0,25	0,21	880	5	600	0,5	450	715	501	209,6

Em ensaios realizados com resfriamento contínuo em uma única e aproximadamente constante taxa, utilizando-se corpos-de-prova de 15 mm por 6 mm, obteve-se uma relação inversa da dureza com a temperatura média de transformação (temperatura quando $XA=0,50$), conforme Figura 11.2. No presente trabalho, entretanto, o conceito de temperatura média perde o sentido uma vez que em $XA \sim 0,50$, a temperatura já estava praticamente constante e, assim, tal tipo de relação não pôde ser explorada.

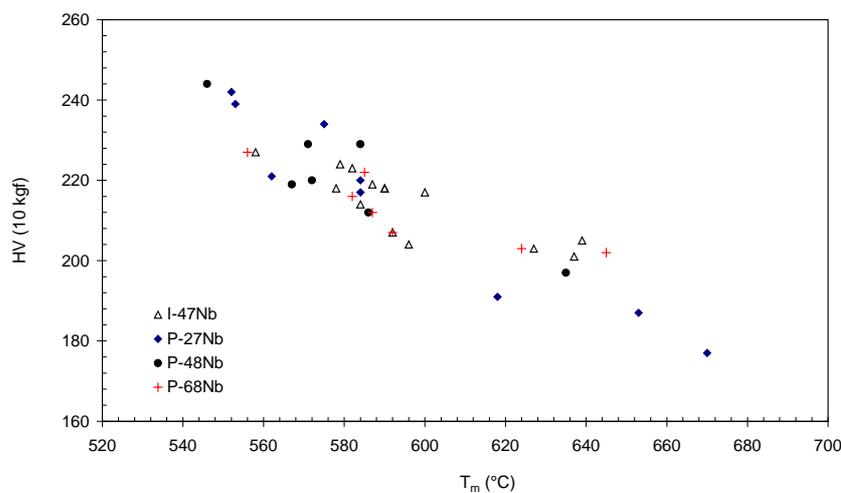


Figura 11.2 - Variação de dureza em função da temperatura média de transformação, T_m , para corpos-de-prova ensaiados com resfriamento a uma taxa constante e contínua.

A partir dos dados da Tabela 11.2, foram construídos os gráficos da Figura 11.3, que mostram o efeito das variáveis de processo na dureza média. Observa-se que a dureza diminui quando a transformação é deslocada para temperaturas mais altas. Então, se a deformação ε_2 aumenta ou a taxa de resfriamento diminui, ocorre amaciamento do aço. Conclui-se que o efeito destas duas variáveis na dureza é similar ao seu efeito em Ar_3 , portanto, espera-se que a dureza, nestes ensaios com dois regimes de resfriamento, seja função da temperatura de início de transformação, o que será examinado a seguir.

No entanto, o efeito da ε_1 não obedeceu à regra acima, de acordo com o primeiro gráfico mostrado na Figura 11.3. Também, não houve um efeito sistemático da temperatura de bobinamento, considerando-se os valores de ε_2 e TR estudados, conforme observado nesta figura.

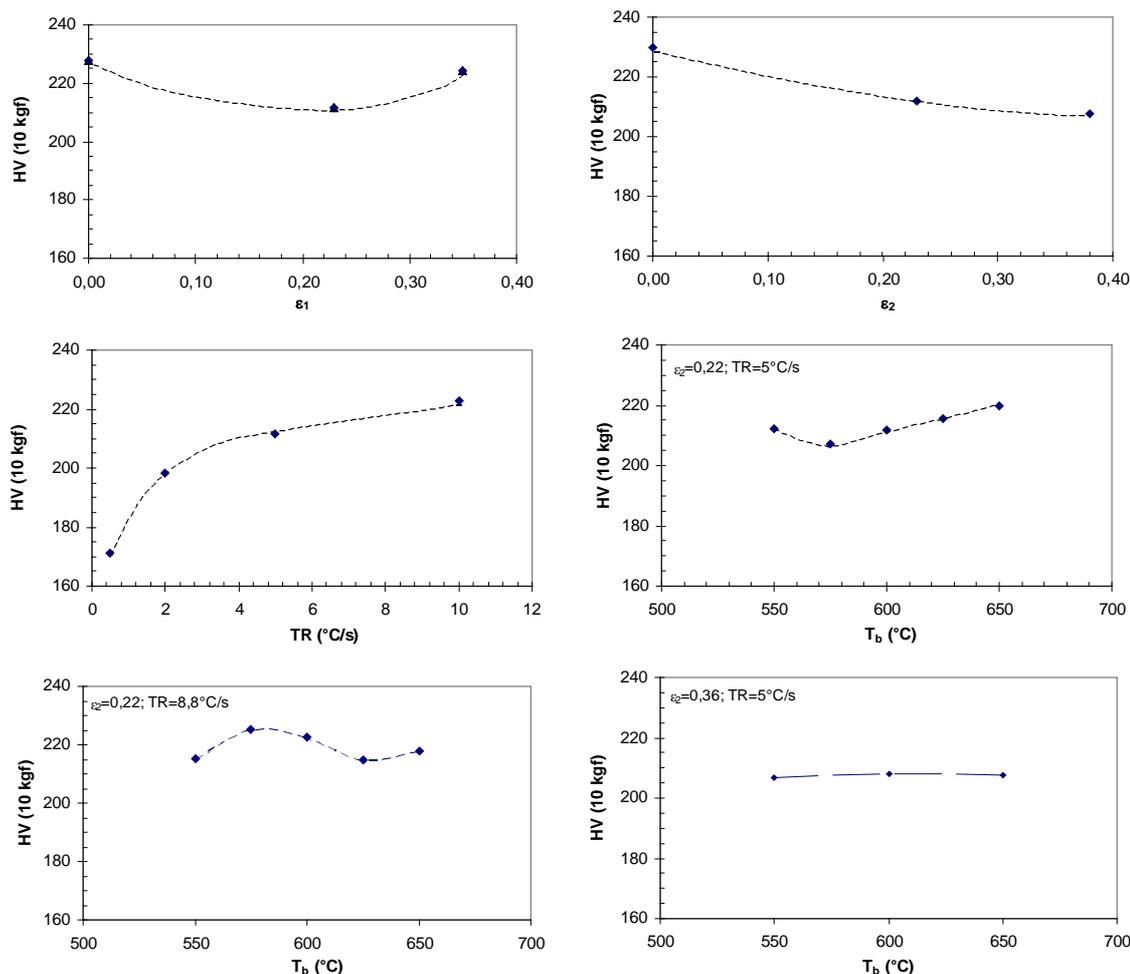


Figura 11.3 - Efeito das variáveis estudadas na dureza dos corpos-de-prova ensaiados do aço I-47Nb.

Diante do exposto, foi traçado o gráfico da dureza em função de Ar_3 , mantendo-se a temperatura de bobinamento em 600°C, Figura 11.4. A dureza aumenta com a queda de Ar_3 até cerca de 680°C, quando se estabiliza em torno de 230 HV. Foram testadas algumas funções matemáticas para descrever tal dependência e a de melhor ajuste foi um polinômio de segundo grau, dado em (11.1). Evidentemente, esta é apenas uma equação matemática, não tendo sentido sua extrapolação fora do domínio de ajuste, o que levaria, por exemplo, à queda da dureza com a Ar_3 em valores abaixo de 683°C.

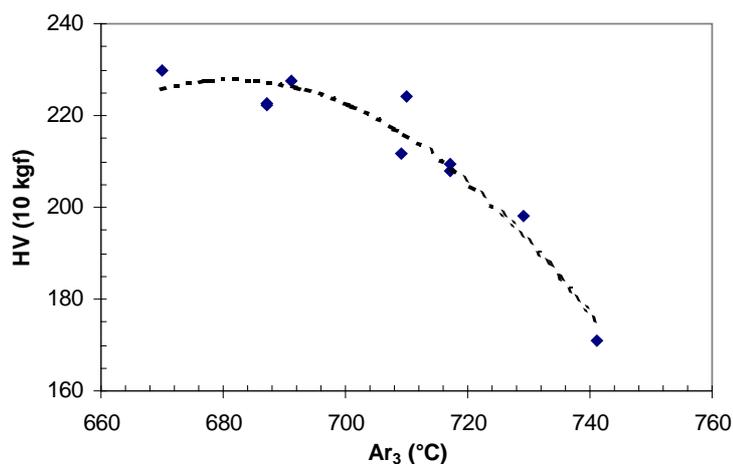


Figura 11.4 - Relação entre dureza e Ar_3 , sendo o bobinamento a $600^{\circ}C$.

$$HV = -0,0149(Ar_3)^2 + 20,357Ar_3 - 6707,7 \quad (11.1)$$

Uma vez que a equação (11.1) é válida somente para $T_b=600^{\circ}C$, seria interessante encontrar um fator de correção incluindo o efeito desta variável. No entanto, o gráfico da Figura 11.5, mostrando a dureza em função de T_b e excluindo-se os pontos para $600^{\circ}C$, não indica um relacionamento matemático plausível para a relação.

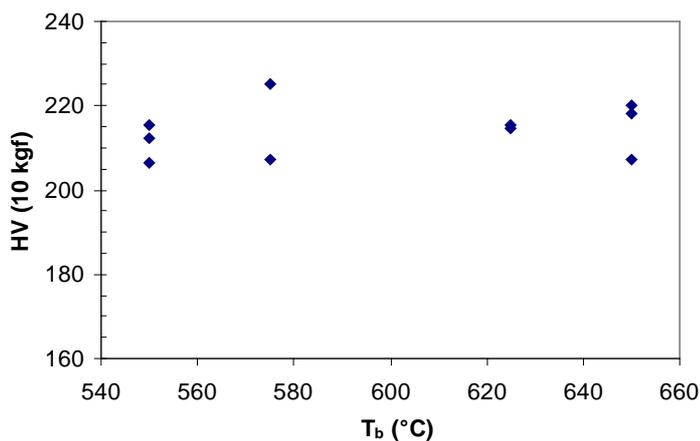


Figura 11.5 - Relação entre a dureza e a temperatura de bobinamento no aço I-47Nb.

Assim, o modelo de Ar_3 possível de ser estabelecido com os resultados obtidos é uma expressão do tipo (11.2), válida dentro do domínio experimental, onde o fator de

correção, $f(T_b)$, poderia ser obtido, caso seja significativo, a partir de corridas industriais.

$$HV = f(T_b) \left[-0,0149(Ar_3)^2 + 20,357Ar_3 - 6707,7 \right] \quad (11.2)$$

11.2. Efeito de Revenir os Corpos-de-prova na sua Microestrutura

No processo industrial, a bobina é resfriada lentamente durante várias horas. Medições da evolução da temperatura em bobinas na Usiminas¹⁸⁰ indicaram taxas de resfriamento de aproximadamente 26°C/min, durante a queda de 100°C iniciais, e de 26°C/h, no resfriamento final. Nos ensaios laboratoriais o tempo de resfriamento após bobinamento foi limitado a 400 s, representando uma queda de 20°C, uma vez que este foi suficiente para completar a transformação.

Para verificar um eventual efeito do prolongamento do resfriamento lento na microestrutura e propriedades finais, três corpos-de-prova bobinados a 600°C foram revenidos em forno de atmosfera controlada com a seguinte condição: resfriamento a 2,6°C/min (0,043°C/s) entre 600 e 500°C, seguido de resfriamento a 26°C/h (0,0072°C/s) até 240°C. Portanto, o tempo total de tratamento foi de 10:38 h.

Na Figura 11.6 são mostradas as microestruturas antes e após o revenimento dos três corpos-de-prova. De uma forma superficial e qualitativa, não há mudança acentuada, por exemplo crescimento de grão, na microestrutura devido ao tratamento. Devido, possivelmente, à mudanças de formas dos carbonetos, tenha havido uma aparente redução da quantidade de ferrita acicular no revenimento.

Foram determinadas a dureza e a fração de ferrita na microestrutura após revenimento pelos mesmos métodos aplicados nas análises dos corpos-de-prova originais. A Tabela 11.3 apresenta uma comparação dessas propriedades antes e após o tratamento. Os resultados tendem a confirmar a avaliação qualitativa de que não houve mudança marcante da microestrutura e propriedades com o tratamento de revenimento, exceto na condição de transformação em temperatura baixa ($TR=10^\circ\text{C/s}$), onde a fração de ferrita teve aumento significativo.

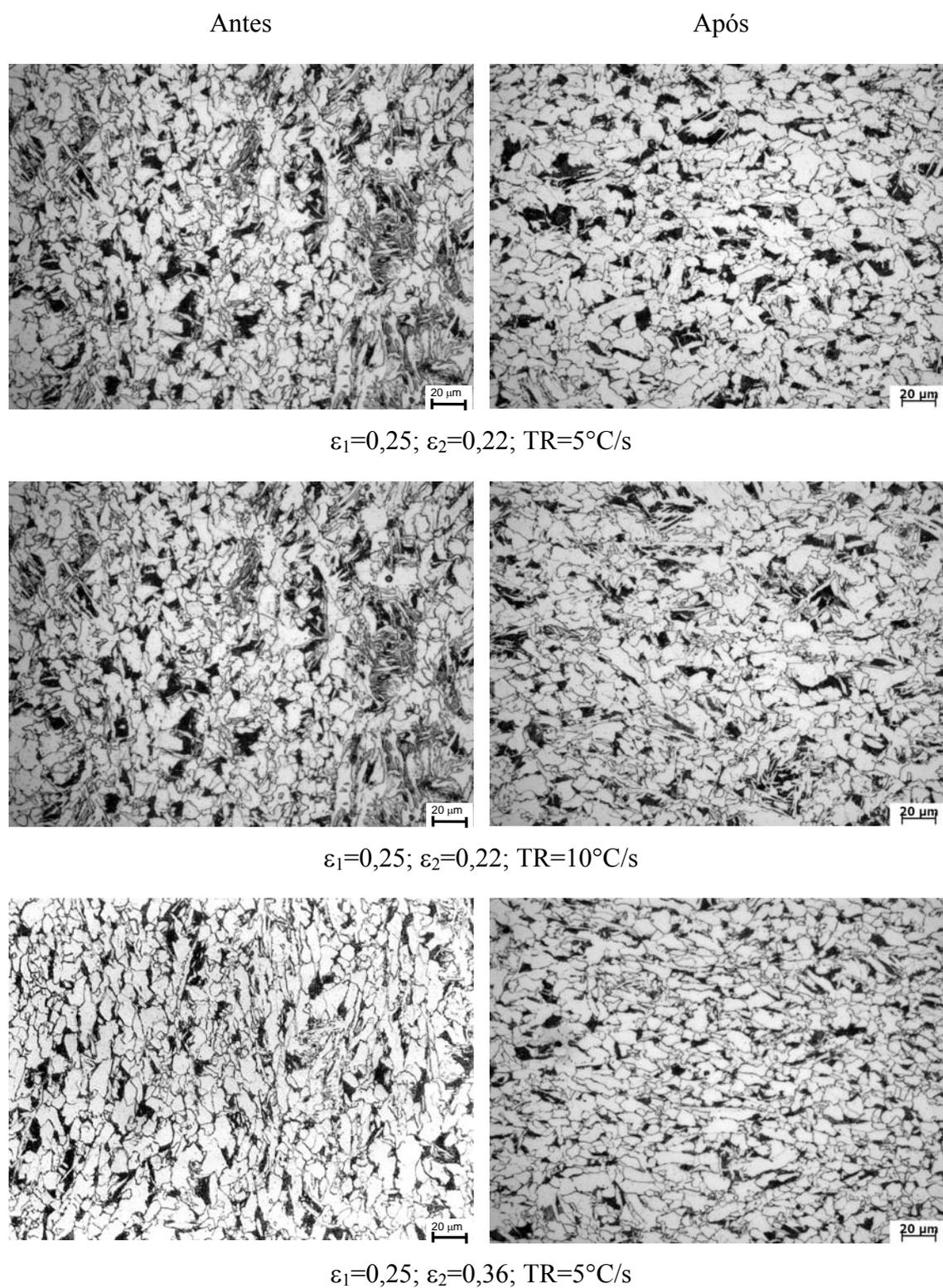


Figura 11.6 - Microestruturas de três corpos-de-prova do aço I-47Nb antes e após revenimento.

Tabela 11.3 - Dureza e fração de ferrita medidas antes de após revenimento de três corpos-de-prova do aço I-47Nb.

ε_1	ε_2	TR (°C/s)	T_b (°C)	HV 10 kgf		Fração ferrita (%)	
				Antes	Após	Antes	Após
0,25	0,22	5	600	211,8	216,4	77,5	79,3
0,25	0,25	10	600	222,6	219,8	64,5	81,1
0,25	0,36	5	600	207,8	210,6	76,6	72,3

Alguns pesquisadores consideram que haja crescimento do grão ferrítico após bobinamento^{115,166}, mas esses casos limitaram-se a aços CMn. Para aços microligados, Militzer⁵⁴ considera que o crescimento seja desprezível e possa ser ignorado. As observações do presente trabalho estão de acordo com essa consideração. O resultado importante dessa análise é que a microestrutura prevista, em termos de tamanho de grão e fases presentes, nos aços microligados, não é significativamente alterada desde que decorridos alguns segundos após o bobinamento e que a temperatura de bobinamento não seja muito baixa. Entretanto, aspectos de precipitação de carbonitreto na ferrita são relevantes, mas não foram investigados.

11.3. Aplicação do Modelo às Condições de Processo Industrial

Neste item é feita uma análise da evolução da microestrutura do aço I-47Nb, em condições do processo industrial, comparando-a com previsões fornecidas pelo presente modelo de transformação aliado a modelos citados na literatura. O intuito é estabelecer bases para o desenvolvimento de modelos integrados de previsão de propriedades mecânicas dos aços.

11.3.1. Evolução da microestrutura até o início da transformação

A partir dos dados de processo industrial do aço em estudo, foi aplicada a metodologia desenvolvida por Siciliano et al.^{98,190} para cálculo da evolução microestrutural e resistência à deformação do material. A laminação é dividida nas etapas de desbaste e acabamento, aplicando-se 10 e 5 passes, respectivamente. As tabelas de 11.4 a 11.7 mostram os resultados dos cálculos, relativos à evolução da microestrutura e da resistência média à deformação (MFS), para essas duas etapas.

De maior interesse nos resultados de evolução da microestrutura são: a ocorrência ou não de recristalização dinâmica (RDX), a fração recristalizada estática ou metadinâmica, X , o tamanho de grão médio da microestrutura parcialmente recristalizada, d , e a deformação acumulada na austenita deformada, ϵ_{ac} . A temperatura inicial da placa, de 1240°C, foi próxima ao encharque dos corpos-de-prova, 1250°C. O tamanho de grão austenítico (TGA) inicial do aço, d_0 , será acima de 60 μm , pois foi este o valor obtido com 4 min de encharque em laboratório. No encharque no processo industrial são dezenas de minutos. Mas é interessante que a alteração deste TGA, dentro da faixa por exemplo 60 a 500 μm , não afeta os resultados. Então foi adotado o valor de 300 μm para d_0 .

Observa-se que ocorre recristalização estática e crescimento de grão após todos os passes da etapa de desbaste. O grão austenítico é refinado de 300 μm para 80,7 μm logo após o último passe desta etapa. Mas com o crescimento de grão entre passes, o TGA atinge 104,3 μm no início do acabamento.

Na etapa de acabamento, o modelo de microestrutura não prevê recristalização dinâmica em nenhum passe, apenas recristalização parcial no intervalo entre passes. Então, após o último passe, o TGA atinge 26,3 μm e a deformação acumulada prevista na austenita é de 0,68. Se a previsão deste modelo for correta, significa que o grão austenítico antes do início da transformação é menor que o utilizado nos ensaios laboratoriais (40 μm mínimo), e a deformação da austenita é superior ao maior valor dos ensaios, 0,36. Estes dois fatores favorecem o refinamento da microestrutura e a estabilização da ferrita poligonal no processo industrial em relação à condição laboratorial, como discutido a seguir.

Tabela 11.4 - Previsão da evolução da microestrutura do aço I-47Nb na etapa de desbaste.

DESBASTE - CÁLCULO DA MICROESTRUTURA																
Passo	R _i (mm)	h _i (mm)	h _f (mm)	n (rpm)	t _e (s)	t _p (s)	t _d (s)	ε _{passo}	ε _{aplicada}	ε̇	T (°C)	T (K)	Z	ε _c	K _s	tps
1	518,7	243,0	214,4	15,66	8	3	0,141	0,20	0,20	1,44	1240	1513	1,3E+13	0,43	1,00	1,00E+300
2	518,7	214,4	177,9	17,04	10	3	0,145	0,28	0,28	1,94	1236	1509	1,9E+13	0,42	1,03	1,00E+300
3	518,7	177,9	150,0	17,66	6	4	0,122	0,25	0,25	2,08	1231	1504	2,2E+13	0,37	1,06	1,00E+300
4	518,7	150,0	127,4	17,71	10	4	0,110	0,24	0,24	2,19	1225	1498	2,6E+13	0,36	1,10	1,00E+300
5	518,7	127,4	110,0	17,71	7	4	0,096	0,21	0,21	2,23	1217	1490	3,2E+13	0,37	1,16	6,10E+156
6	518,7	110,0	95,4	17,71	10	4	0,088	0,21	0,21	2,33	1208	1481	4,0E+13	0,39	1,22	3,03E+81
7	518,7	95,4	79,1	17,71	24	6	0,093	0,26	0,26	2,81	1195	1468	6,3E+13	0,43	1,33	2,70E+41
8	494,7	79,1	60,4	13,54	10	11	0,131	0,36	0,36	2,74	1178	1451	8,8E+13	0,44	1,49	8,09E+21
9	494,7	60,4	43,3	13,71	11	14	0,122	0,43	0,43	3,51	1152	1425	2,0E+14	0,45	1,78	7,38E+10
10	494,7	43,3	31,3	13,73	40	20	0,102	0,41	0,41	4,04	1110	1383	6,0E+14	0,50	2,41	1,08E+05

Soma	d ₀ / d _{rex}								σ _{misaka}	MFS _{star}	σ _{ss}			MFS _{din.}	MFS _{passo}	1000/T
tip/tps	ppt?	300	RDX ?	t ₉₅	X	d (μm)	sac	(MPa)	(MPa)	(MPa)	ε _{0,5din}	X _{din}	(MPa)	(MPa)	(K ⁻¹)	
0,000	Não	252,6	Não	3,69	1,00	255,0	0	56,2	59,0	63,6	0,338	0,000	59,0	59,0	0,661	
0,000	Não	182,0	Não	2,52	1,00	191,2	0	62,9	66,1	65,8	0,333	0,000	66,1	66,1	0,663	
0,000	Não	160,6	Não	1,61	1,00	170,5	0	62,6	65,7	66,8	0,315	0,000	65,7	65,7	0,665	
0,000	Não	154,6	Não	1,45	1,00	168,6	0	62,8	65,9	67,8	0,312	0,000	65,9	65,9	0,668	
0,000	Não	165,4	Não	1,71	1,00	172,8	0	62,2	65,3	68,9	0,319	0,000	65,3	65,3	0,671	
0,000	Não	173,0	Não	2,14	1,00	179,6	0	62,8	65,9	70,4	0,330	0,000	65,9	65,9	0,675	
0,000	Não	151,8	Não	2,69	1,00	167,5	0	68,9	72,3	73,3	0,350	0,000	72,3	72,3	0,681	
0,00	Não	116,8	Não	2,84	1,00	132,9	0	75,4	79,1	75,5	0,361	0,000	79,1	79,1	0,689	
0,000	Não	88,7	Não	2,75	1,00	110,9	0	84,2	88,3	81,3	0,374	0,000	88,3	88,3	0,702	
0,001	Não	80,7	Não	4,53	1,00	104,3	0	91,0	95,5	89,8	0,413	0,000	95,5	95,5	0,723	

Tabela 11.5 - Previsão da evolução da microestrutura do aço I-47Nb na etapa de acabamento.

ACABAMENTO - CÁLCULO DA MICROESTRUTURA																
Passo	R _i (mm)	h _i (mm)	h _f (mm)	n (rpm)	t _i (s)	t _d	ε _{passo}	ε _{aplicada}	ε	T (°C)	T (K)	Z	ε _c	K _s	tps	
1	324,2	31,3	24,69	37,9	2,82	0,034	0,31	0,31	8,95	1019	1292	1,3E+16	1,20	4,97	75,04	
2	338,3	24,69	20,74	43,6	2,37	0,023	0,23	0,47	9,94	991	1264	3,2E+16	1,19	6,33	47,57	
3	351,5	20,74	17,07	50,8	1,95	0,018	0,25	0,62	13,50	963	1236	9,7E+16	1,22	8,17	23,66	
4	323,4	17,07	14,07	65,9	1,63	0,013	0,25	0,75	18,34	935	1208	3,1E+17	1,27	10,66	15,51	
5	330,6	14,07	12,88	71,8	1,50	0,008	0,12	0,75	14,82	907	1180	6,0E+17	1,26	14,08	31,08	

Soma	d ₀ / d _{rex}								σ _{misaka}	MFS _{star}	σ _{ss}			MFS _{din.}	MFS _{passo}	1000/T
tip/tps	ppt?	104,3	RDX ?	t ₉₅	X	d (μm)	ε _{ac}	(MPa)	(MPa)	(MPa)	ε _{0,5din}	X _{din}	(MPa)	(MPa)	(K ⁻¹)	
0,037	Não	94,1	Não	33,86	0,22	75,9	0,24	111,6	117,2	118,6	0,587	0,000	117,2	117,2	0,774	
0,087	Não	57,6	Não	30,21	0,21	54,6	0,37	130,5	136,9	128,4	0,608	0,000	136,9	136,9	0,791	
0,168	Não	38,3	Não	28,62	0,18	40,3	0,50	152,5	160,0	141,9	0,638	0,000	160,0	160,0	0,809	
0,273	Não	27,4	Não	30,56	0,15	31,4	0,64	175,4	184,1	157,4	0,678	0,000	184,1	184,1	0,828	
0,320	Não	23,1	Não	40,39	0,10	26,3	0,68	181,9	190,9	167,3	0,715	0,000	190,9	190,9	0,847	

Tabela 11.6 - Previsão da evolução da tensão média de escoamento do aço I-47Nb na etapa de desbaste.

DESBASTE - CÁLCULO DA TENSÃO MÉDIA

Passe	R _i (mm)	h _i (mm)	h _f (mm)	F (t)	V _r	r	T1	T2	R'	ΦN	α	Ve	Y	T3	Q	MFS _s	ε _r
1	518,7	243,0	214,4	1228	0,8504	0,118	-0,0316	0,17509	521,841	0,093	0,235	0,86449	218,9	-0,130561	0,8994	58,92	0,059
2	518,7	214,4	177,9	1583	0,9256	0,170	-0,0429	0,212656	521,873	0,1	0,265	0,94811	183,15	-0,219954	0,9323	64,85	0,067
3	518,7	177,9	150,0	1495	0,9591	0,157	-0,036	0,203588	522,62	0,091	0,232	0,98265	154,32	-0,212388	0,9438	69,15	0,058
4	518,7	150,0	127,4	1256	0,9622	0,151	-0,0318	0,199316	522,766	0,084	0,208	0,9864	131,07	-0,215735	0,9574	63,62	0,052
5	518,7	127,4	110,0	1193	0,9622	0,137	-0,0266	0,18927	523,716	0,076	0,183	0,9855	112,99	-0,203323	0,9653	68,25	0,046
6	518,7	110,0	95,4	1046	0,9622	0,133	-0,024	0,18645	523,941	0,07	0,167	0,98581	97,988	-0,208267	0,9781	64,46	0,042
7	518,7	95,4	79,1	1281	0,9622	0,171	-0,0287	0,213066	524,449	0,073	0,177	0,99332	81,879	-0,304627	1,0247	71,28	0,044
8	494,7	79,1	60,4	2348	0,70	0,236	-0,037	0,253879	503,46	0,077	0,193	0,73401	63,383	-0,500396	1,0977	116,2	0,048
9	494,7	60,4	43,3	2251	0,7102	0,283	-0,0387	0,28053	503,884	0,073	0,184	0,75218	45,983	-0,725271	1,1941	107,1	0,046
10	494,7	43,3	31,3	2154	0,7112	0,277	-0,0321	0,277202	507,224	0,063	0,154	0,75533	33,308	-0,805832	1,2718	114,4	0,039

Tabela 11.7 - Previsão da evolução da tensão média de escoamento do aço I-47Nb na etapa de acabamento.

ACABAMENTO - CÁLCULO TENSÃO MÉDIA

C = (-) 2,32E-11 w (mm) = 1610

Passe	R _i (mm)	h _i (mm)	h _f (mm)	F (t)	V _r (ms)	r	T1	T2	R'	ΦN	α	Ve	Y	T3	Q	MFS _s	ε _r
1	324,2	31,3	24,69	1739	1,29	0,211	-0,0257	0,2387	336,2	0,060	0,140	1,345	25,9	-0,526	1,1722	165,9	0,035
2	338,3	24,69	20,74	1433	1,54	0,160	-0,0170	0,2057	355,6	0,047	0,105	1,602	21,5	-0,410	1,1655	172,9	0,026
3	351,5	20,74	17,07	1672	1,87	0,177	-0,0169	0,2171	374,1	0,045	0,099	1,949	17,8	-0,510	1,2354	192,5	0,025
4	323,4	17,07	14,07	1680	2,23	0,176	-0,0158	0,2163	348,9	0,042	0,093	2,327	14,7	-0,528	1,2584	217,5	0,023
5	330,6	14,07	12,88	1065	2,48	0,085	-0,0068	0,1475	372,3	0,028	0,057	2,539	13,2	-0,235	1,1260	236,9	0,014

A ausência de recristalização dinâmica na etapa de acabamento, indicada pelo cálculo de evolução de microestrutura, é reforçada pelos cálculos de resistência à deformação, Figura 11.7. São mostrados os valores medidos, correspondentes ao cálculo inverso da resistência a partir das cargas de laminação medidas, e os calculados, baseando-se nas formulações de Siciliano et al.^{98,190}. Isto é verificado pelo aumento progressivo da resistência à deformação, tanto medida quanto calculada, com a seqüência de passes de laminação, embora o cálculo a tenha subestimado.

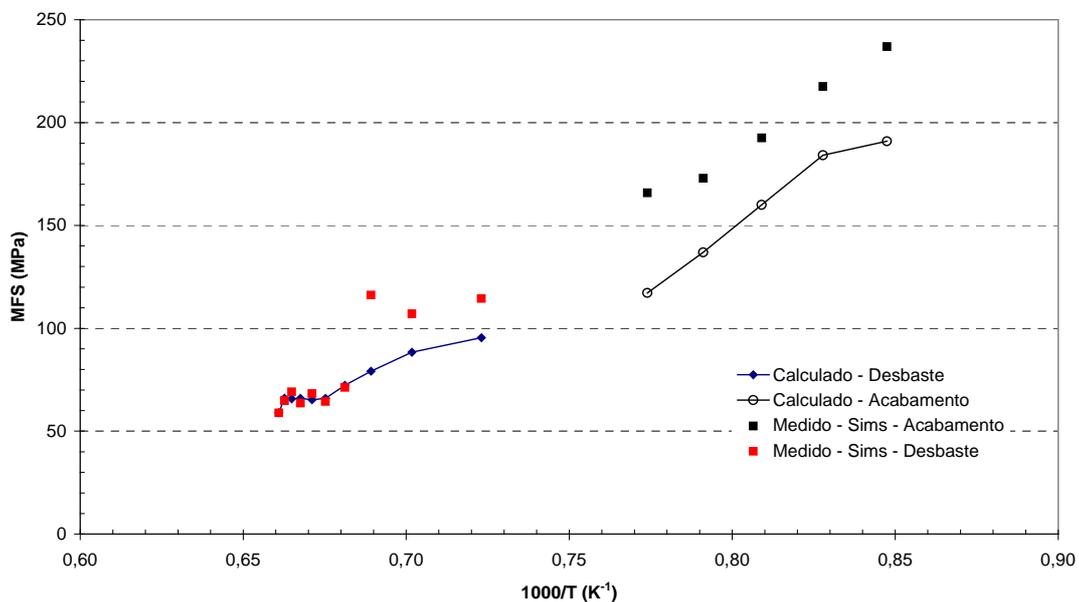


Figura 11.7 - Resistência média à deformação calculada e medida durante a laminação do aço I-47Nb.

Quanto ao TGA ao final da laminação, têm sido verificados na literatura^{13,116,117,191} valores entre 10 e 20 μm . Portanto, o cálculo de 26,3 μm indica uma superestimativa.

11.3.2. Aplicação do modelo de transformação desenvolvido

A aplicação do modelo ao processamento industrial do aço em estudo, feita a seguir, deve ser considerada com cautela, pois os resultados são preliminares, uma vez que vários parâmetros de entrada do modelo desenvolvido são aproximados. Somente através de sistemas de controle *on line*, acoplados ao modelo de transformação aqui desenvolvido, poderia se gerar resultados mais precisos. De qualquer forma, os

resultados encontrados foram consistentes com a observação da microestrutura e propriedades da bobina processada industrialmente.

A primeira etapa do modelo é a determinação da A_{r3} . A taxa de resfriamento média da tira do aço I-47Nb na mesa de resfriamento foi de 9°C/s . Esta taxa é muito aproximada, dado que o regime de resfriamento, convecção natural ou forçada, não é constante ao longo da mesa. Dadas a deformação $\varepsilon_2=0,68$ ($\varepsilon_2=\varepsilon_{ac}$) e $d\gamma=26,32\ \mu\text{m}$, Tabela 11.5, além da composição química do aço, foi aplicada a equação (8.14) para cálculo de A_{r3} . O valor obtido foi 730°C , Tabela 11.8, onde também são mostrados os resultados da aplicação de outras equações de literatura. Ressalta-se que as equações de Choo¹⁶¹ e Santos¹⁵ foram desenvolvidas para aços CMn, sendo a austenita não deformada, mas fornece valores de A_{r3} próximos do aço microligado com a austenita deformada.

Tabela 11.8 - Previsão da A_{r3} do aço I-47Nb processado industrialmente.

ε_2 (mm/mm)	TR ($^\circ\text{C/s}$)	$d\gamma$ (mm)	A_{r3} calculada ($^\circ\text{C}$)							
			Modelo	Choo ¹⁶¹	Santos ¹⁵	Blas ¹⁸¹	Ouchi ¹⁰⁴	Majta ¹¹⁹	Nakata ¹¹²	Miettinen ⁶⁵
0,68	9	26,3	730	744	736	710	757	771	695	726

De posse da A_{r3} , a próxima etapa é o cálculo da cinética de transformação. Além dos dados de entrada mostrados na Tabela 11.8, necessita-se também da temperatura de bobinamento para aplicação da rede neural no cálculo do parâmetro B. No topo da tira, T_b foi cerca de 600°C . Ressalta-se que a rede neural deveria, a princípio, ser aplicada somente dentro do seu domínio de derivação, ou seja, não seria confiável para os dados da Tabela 11.8, onde ε_2 ficou acima da faixa estudada e $d\gamma$ abaixo. Porém, como uma aproximação, foram aplicados estes dados aos parâmetros da rede dados na Tabela 10.9. Com isso, o parâmetro B calculado foi -3,9219, do qual foi obtido o parâmetro $A=0,00150$, pela equação (10.5).

Então, com estes parâmetros, podem ser calculadas as curvas da cinética de transformação, as quais são mostradas na Figura 11.8. Para isso, foi calculado o decréscimo da temperatura a 9°C/s entre 730°C e 600°C , e a partir daí, a $0,043^\circ\text{C/s}$ até o final da transformação. Observa-se que no momento do bobinamento, a fração

transformada é em torno de 0,31, ou seja, a maior parte da transformação ocorre no resfriamento lento.

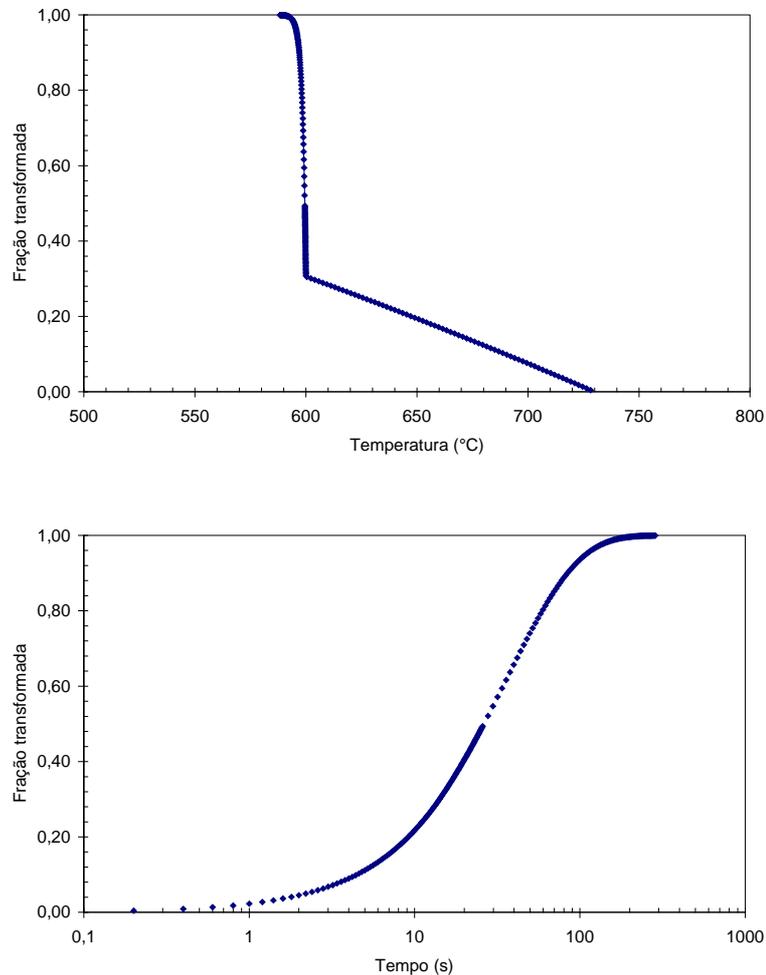


Figura 11.8 - Cinética de transformação calculada para condições de processo industrial do aço I-47Nb.

A seguir determinam-se as frações de ferrita e perlita formadas. Aplicando-se o procedimento de cálculo do enriquecimento da austenita em C à cinética de transformação, juntamente com o critério de atingimento da linha A_{cm} em paraequilíbrio e extrapolada, obtém-se a fração formada de ferrita de 0,722, sendo o teor de C na austenita igual a 0,3442%. A fração medida de ferrita na amostra da bobina, mostrada na Figura 11.1, foi de 0,761. Portanto, considerando-se a aproximação do cálculo e erros de medida, pode-se considerar satisfatória a previsão da fração das fases formadas.

A Figura 11.9 ilustra a cinética de transformação prevista, destacando a formação da ferrita e da perlita. A linha vertical informa o momento do início do bobinamento.

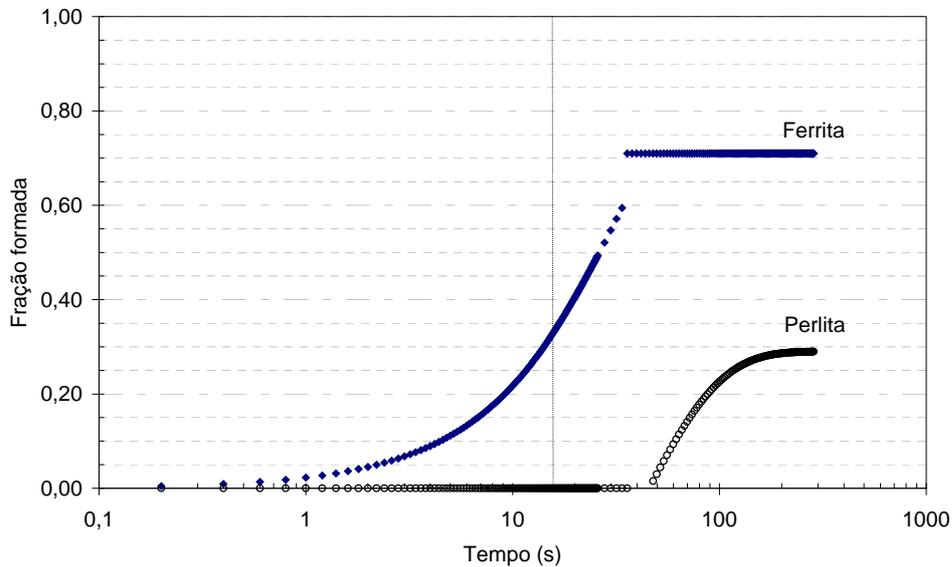


Figura 11.9 - Cinética calculada de formação das fases ferrita e perlita para condições de processo industrial do aço I-47Nb.

Finalmente, a dureza prevista para o aço, de acordo com a equação (11.12), tomando-se $f(T_b) = 1$ (bobinamento a 600°C) é de 195,5 HV, que se aproxima razoavelmente de 203,4 HV que foi o valor médio na amostra da bobina industrial.

11.4. Comparação entre a Microestrutura Industrial e as Obtidas nos Ensaio

Como se observa na Figura 10.1, a microestrutura da amostra da bobina industrial foi constituída de ferrita aproximadamente poligonal e perlita, não havendo constituintes aciculares. Foi mostrado que, numa aproximação preliminar, o modelo apresentado previu bem a cinética de transformação e as fases formadas. Porém, o modelo foi desenvolvido a partir de resultados de microestruturas com a presença de ferrita acicular em quantidade minoritária. Além disso, esta previsão não informa qual tipo de ferrita seria formada.

Já foi bastante discutido que o aumento da deformação da austenita e o refinamento do grão recristalizado têm o efeito de facilitar a formação da ferrita poligonal. Então, de

acordo com os dados usados na simulação do processo industrial, Tabela 11.8, espera-se, com a aplicação do modelo desenvolvido aqui, maior quantidade de ferrita poligonal calculada na microestrutura da bobina industrial, que a quantidade observada nos corpos-de-prova ensaiados em laboratório.

Para confirmar esta expectativa, foram realizados ensaios onde as deformações ε_1 e ε_2 foram superiores aos valores programados para os ensaios dilatométricos. Em temperaturas intermediárias de transformação, T_i , supostamente próximas ao início de formação da perlita, foi aplicado resfriamento rápido com água, interrompendo-se a transformação para ferrita e perlita. Nestes ensaios não foram feitas medidas dilatométricas, pois com estes níveis de deformação na Gleeble, o comprimento final do corpo-de-prova fica menor que o diâmetro do extensômetro, esmagando-o. A Tabela 11.9 mostra as condições destes ensaios.

Tabela 11.9 - Condições dos ensaios com deformações ε_1 e ε_2 acima dos valores programados e aplicação de têmpera durante a transformação.

Ensaio	Aço	ε_1 (mm/mm)	ε_2 (mm/mm)	TR (°C/s)	T_b (°C)	T_i (°C)
165A	P-48Nb	0,50	0,34	5	600	598
1165B	P-48Nb	0,41	0,29	5	600	598
166	I-47Nb	0,40	0,30	5	600	590

As microestruturas obtidas são mostradas na Figura 11.10. Salienta-se que as regiões de coloração cinza escuro correspondem à martensita obtida no resfriamento rápido. Observa-se a formação de ferrita, aproximadamente poligonal, alguma quantidade de perlita, mas não se percebe quantidade significativa de ferrita acicular. Ou seja, comparativamente aos ensaios com medidas dilatométricas, a microestrutura nestes casos tendeu a se aproximar daquela obtida em escala industrial. Isto é uma evidência de que no processo industrial, a maior deformação da austenita, ε_2 , e o menor tamanho de grão antes da transformação, d_γ , em relação aos ensaios realizados com dilatometria, sejam os responsáveis pela formação de somente ferrita poligonal e perlita.

Adicionalmente, a microestrutura do processo industrial é mais refinada. A Tabela 11.10 mostra o tamanho de grão ferrítico na tira industrial, nos corpos-de-prova

mencionados acima, e em alguns corpos-de-prova dos ensaios com dilatômetro, onde a formação de ferrita foi predominantemente poligonal. Também no aspecto de tamanho de grão, fica claro que as maiores deformações tendem a aproximar a microestrutura obtida em laboratório daquela industrial. Nesta tabela são mostradas também as frações volumétricas da ferrita e a A_{r3} medida ou calculada, sendo que a A_{r3} calculada foi para os corpos-de-prova sem utilização de dilatômetro (ensaios relativos às microestruturas da Figura 11.10) e para a amostra industrial.

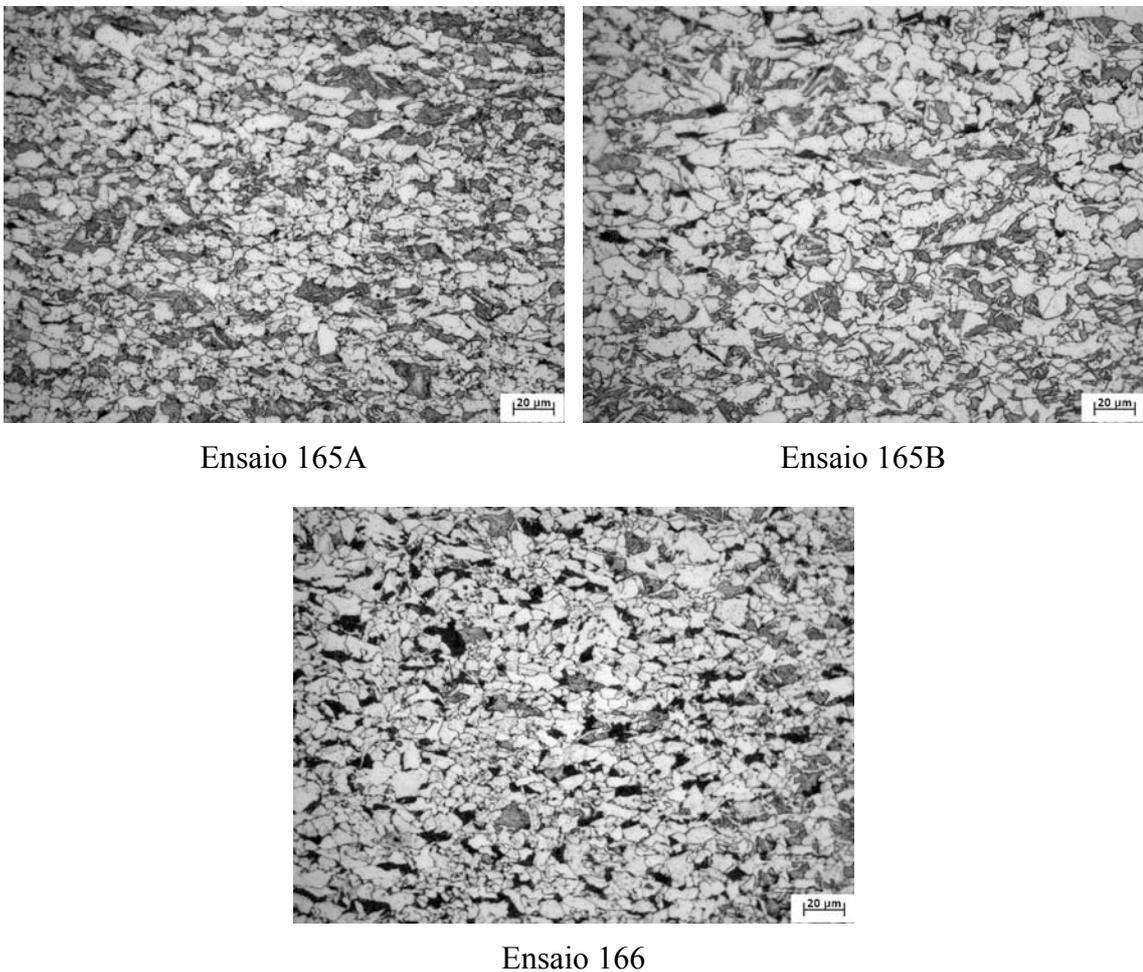


Figura 11.10 - Microestruturas dos corpos-de-prova ensaiados conforme condições da Tabela 11.9.

Das análises sobre as características microestruturais anteriores, fica evidente que, no processo industrial, a deformação da austenita abaixo de T_{nr} e o tamanho de grão recristalizado, são, respectivamente, maior e menor que nos ensaios dilatométricos

realizados, e que essa é a razão que explica a diferença observada entre as microestruturas obtidas em laboratório e no processo industrial.

Tabela 11.10 - Tamanho de grão ferrítico e fração de ferrita da amostra industrial e de corpos-de-prova ensaiados em laboratório em diversas condições.

Ensaio	Aço	ε_1	ε_2	$d\gamma$ (μm)	TR ($^{\circ}\text{C/s}$)	T_b ($^{\circ}\text{C}$)	A_{r_3} ($^{\circ}\text{C}$)	Ferrita (%)	$d\alpha$ (μm)
Industrial	I-47Nb	2,76	0,48	15,2	9	600	741*	76,1	3,7
165A	P-48Nb	0,50	0,34	-	5	600	717*	76,4	5,3
165B	P-48Nb	0,41	0,29	-	5	600	715*	77,1	5,2
166	I-47Nb	0,40	0,30	-	5	600	715*	87,8	5,0
158	I-47Nb	0,24	0,23	48	2	600	729	81,1	7,7
157	I-47Nb	0,22	0,39	40	10	650	700	78,3	7,1
117	I-47Nb	0,24	0,22	48	5	625	707	76	7,0
113	I-47Nb	0,35	0,24	40	5	600	715	73,6	7,5
105	I-47Nb	0,23	0,21	48	0,5	600	748	78,7	8,8
71	I-47Nb	0,25	0,37	48	5	650	725	70,4	7,0

*: valor calculado

11.5. Previsão do Tamanho de Grão Ferrítico

Devido à microestrutura relativamente complexa dos corpos-de-prova ensaiados, com presença de ferrita acicular, não foi realizada a determinação do tamanho do grão ferrítico ($d\alpha$) em todas as amostras, pois a imprecisão seria muito grande. Em alguns dos ensaios, além da bobina industrial, o $d\alpha$ foi determinado pela contagem de interceptos em 26 campos. Os resultados foram mostrados na Tabela 11.10.

Foram, então, selecionadas algumas equações apresentadas no item 3.9 da revisão bibliográfica e aplicadas às condições dadas na tabela anterior. Estas equações foram desenvolvidas para aços microligados, equações de Sellars e Beynon¹⁶⁸, Bengochea et al.¹⁴¹, Kvackaj e Mamuzic¹⁰², ou para aços CMn mas com a austenita deformada antes da transformação, equação de Choquet¹⁷¹ e Saito³. Para aplicação destas equações aos ensaios 165A, 165B e 166, foi necessário um cálculo estimativo do tamanho de grão austenítico recristalizado antes da transformação. Uma vez que não foi feita a medição do tamanho de grão austenítico após as deformações ε_1 de 0,40 e 0,50, que foram aplicadas aos três ensaios acima, foi necessária sua estimativa. Para isso, foi realizada uma extrapolação exponencial dos resultados do tamanho de grão, de acordo com a equação (6.1), e considerando-se o tamanho de grão medido após as deformações ε_1 de

0,22 e 0,36. Os valores obtidos são mostrados na Tabela 11.11 para os ensaios 165A, 165B e 166.

Também na Tabela 11.11 são mostrados os valores de $d\alpha$ calculados para os ensaios em questão, e incluindo a amostra industrial. Nota-se que a equação de Saito³ subestima o tamanho de grão ferrítico, enquanto que a de Bengochea et al.¹⁴¹ o superestima. No caso deste último, as taxas de resfriamento utilizadas foram muito baixas, o que tornaria inválida a aplicação da equação para condições extrapoladas. As outras três equações forneceram valores de $d\alpha$ relativamente próximos dos medidos, exceto para a menor taxa de resfriamento, 0,5°C/s. Mas entre as três equações, a melhor aproximação com os resultados medidos foi obtida pela equação de Choquet.

Tabela 11.11 - Previsão do tamanho de grão ferrítico por equações de literatura.

Ensaio	ε_1	ε_2	TR (°C/s)	$d\gamma$ μm	T_b (°C)	$d\alpha$ (μm)	Cálculos por equações de literatura				
							Sellars ¹⁶⁸	Bengochea ¹⁴¹	Kvackaj ¹⁰²	Choquet ¹⁷¹	Saito ³
Industrial		0,48	9	15,2	~600	3,7	5,2	12,8	3,9	3,9	0,6
165A	0,50	0,34	5	28	600	5,3	7,9	14,8	6,3	5,8	1,3
165B	0,41	0,29	5	35	600	5,2	9,1	15,3	7,4	6,5	1,4
166	0,40	0,30	5	36	600	5,0	9,1	15,2	7,4	6,5	1,5
158	0,24	0,23	2	48	600	7,7	11,7	16,2	10,7	9,0	3,4
157	0,22	0,39	10	40	650	7,1	9,0	14,4	6,3	5,5	0,9
117	0,24	0,22	5	48	625	7,0	11,1	16,1	9,4	7,7	1,7
113	0,35	0,24	5	40	600	7,5	10,0	15,9	8,4	7,1	1,5
105	0,23	0,21	0,5	48	600	8,8	13,5	16,9	13,9	11,7	10,0
71	0,25	0,37	5	48	650	7,0	10,2	14,7	7,8	6,7	1,7

Esta análise demonstra que: (i) o tamanho de grão ferrítico dos aços, processados tanto em escala industrial quanto em laboratório, pode ser previsto com suficiente precisão por equações de literatura, desde que sejam selecionadas e ajustadas tais equações para os aços em estudo e as condições específicas do processo; (ii) em um modelo integrado de previsão de propriedades mecânicas, o ajuste da equação pode ser feito com base em resultados de aços processados industrialmente; (iii) em consonância com as conclusões do item anterior, o refino da microestrutura do aço industrial em relação aos ensaios de laboratório pode ser atribuído ao maior condicionamento da austenita acima e abaixo da temperatura de não recristalização no processo industrial.

11.6. Resumo

Neste capítulo foram abordadas, basicamente, a caracterização da microestrutura e dureza da bobina processada industrialmente, comparativamente às microestruturas e durezas dos corpos-de-prova ensaiados em laboratórios, e a aplicação do modelo desenvolvido às condições do processo industrial, para testar sua capacidade de extrapolação e generalização. Mostrou-se que a microestrutura da bobina foi constituída de ferrita aproximadamente poligonal e perlita, com tamanho de grão ferrítico de 3,7 μm e dureza de 203 HV. As microestruturas dos ensaios laboratoriais apresentaram, além dos componentes acima, alguma ferrita acicular. A dureza, para taxas de resfriamento de 5 e 10°C/s, situou-se entre 210 e 230 HV, e o tamanho de grão ferrítico foi cerca de 7 μm . Foi demonstrado que a diferença de microestrutura dos ensaios laboratoriais para a de bobina deve-se ao maior condicionamento da austenita abaixo da temperatura de não-recristalização e ao menor tamanho de grão austenítico recristalizado no processo industrial. Mostrou-se ainda que o modelo integrado desenvolvido, quando extrapolado para as condições industriais, forneceu previsões de microestruturas e durezas próximas daquelas observadas na bobina. Para previsão do tamanho de grão ferrítico, foi selecionada uma equação de literatura que forneceu melhor previsão dos valores medidos nos ensaios laboratoriais e no processo industrial.

12. CONCLUSÕES

Foi estudada a transformação de fases de um aço base 0,11%C-1,50%Mn-0,19%Si-0,047%Nb-0,042%V-0,012%Ti, utilizando-se ensaios no simulador termomecânico Gleeble 3500. As condições de ensaio foram selecionadas para representar, com maior aproximação possível, o processo industrial de laminação em tiras a quente deste aço, ou seja, foi empregada uma etapa de encharque a 1250°C, uma deformação de desbaste, uma deformação de acabamento, seguida do resfriamento em dois regimes, um em alta taxa até o bobinamento, e outro subsequente, em baixa taxa. As variáveis estudadas foram as deformações aplicadas, a taxa de resfriamento rápido e a temperatura de bobinamento, além do teor de Nb do aço.

As microestruturas obtidas nos ensaios laboratoriais com os aços estudados foram constituídas de ferrita poligonal, ferrita acicular, perlita e ilhas de martensita. Quanto maior a deformação aplicada acima da temperatura de não-recristalização, menor o tamanho do grão austenítico recristalizado, o que favoreceu a formação de ferrita poligonal e o refino da microestrutura. O mesmo efeito foi apresentado pela deformação de encruamento da austenita, aplicada abaixo da T_{nr} . O efeito da taxa de resfriamento foi contrário ao das deformações, favorecendo a formação de constituinte acicular. Porém, se o condicionamento da austenita é intenso, o efeito da taxa tende a ser mascarado. Quanto mais baixa a temperatura de bobinamento, maior a quantidade de constituintes aciculares, pois uma fração substancial da transformação passa a ocorrer em baixas temperaturas. Quanto aos aços processados em escala piloto, não foi observado efeito significativo do teor de Nb na microestrutura formada. Comparando-se com as microestruturas dos corpos-de-prova ensaiados por dilatometria, aquelas observadas em corpos-de-prova obtidos do aço processado industrialmente pareceram mais grosseiras que as observadas em corpos-de-prova obtidos dos aços processados em escala piloto, o que foi atribuído ao maior tamanho de grão austenítico após o encharque no ciclo termomecânico empregado do aço proveniente do esboço industrial.

As deformações aplicadas ao aço acima e abaixo da temperatura de não recristalização tiveram o efeito de elevar a temperatura de início de transformação, A_{r3} . O aumento da taxa de resfriamento, ao contrário, reduziu a A_{r3} . Porém, tais efeitos não foram lineares e saturaram em determinado valor, além de apresentarem interações. Essas conclusões possuem o respaldo na literatura e foram justificadas baseando-se no conceito de taxa de nucleação da ferrita. Foi deduzida uma equação empírica para previsão da A_{r3} em função dessas variáveis, além da composição do aço, dada indiretamente pela temperatura de equilíbrio, A_{e3} . Obteve-se uma boa aproximação entre valores medidos e calculados, sendo o coeficiente de determinação $r^2=0,93$. Embora não seja originada de conceitos fundamentais de nucleação, a equação deduzida apresenta interesse prático pela sua simplicidade e boa precisão.

Foi analisado o efeito das variáveis estudadas, deformação acima e abaixo de T_{nr} , taxa de resfriamento e temperatura de bobinamento, na cinética global de decomposição da austenita. De uma forma geral, temperaturas mais baixas de transformação, favorecidas por menores deformações e temperaturas de bobinamento ou maiores taxas de resfriamento, resultam em maiores taxas de transformação. Não foi observado efeito significativo e sistemático do Nb nos aços estudados na cinética de transformação. Com relação à rota de processamento, houve tendência do aço processado em escala industrial apresentar taxas de transformação ligeiramente inferiores à dos aços processados em escala piloto.

A cinética de transformação global da austenita foi modelada pela equação de Avrami, com o expoente $n = 1$, conjugada com a aplicação da regra da aditividade. O parâmetro b desta equação foi descrito como uma função exponencial da temperatura, empregando-se duas constantes denominadas A e B . Foi verificado que tais constantes estão relacionadas, de forma que apenas uma delas precisou ser modelada em função das variáveis de processo. Não foi encontrada uma formulação analítica precisa o suficiente para prever a constante B escolhida, mas o emprego de uma rede neural artificial permitiu atingir tal objetivo. Com isso, a rede neural é utilizada para prever o valor de B e, pela relação entre as variáveis, calcula-se A . Mostrou-se que existe uma relação matemática entre A e B e as constantes utilizadas quando o parâmetro b é calculado por uma expressão do tipo Arrhenius.

O fato de ter sido obtido um bom ajuste do modelo de transformação com $n=1$ indica que a decomposição da austenita, seja durante a formação da ferrita ou da perlita, ocorre com controle por saturação de sítios. O fato de apenas um outro parâmetro, no caso do modelo desenvolvido A ou B, ser suficiente para descrever toda a cinética de transformação sugere apenas um mecanismo operante no controle de toda a transformação, e este mecanismo seria o difusional. Além disso, foi mostrado que B, ou um outro parâmetro, por exemplo o expoente de uma equação tipo Arrhenius, deve estar relacionado a alguma energia específica de transformação, seja uma força motriz ou energia de ativação aparente.

Foram desenvolvidos procedimentos para cálculo da fração formada de ferrita, e conseqüentemente da perlita, no caso dos aços estudados. Neste procedimento, calcula-se o enriquecimento em C da austenita e, quando o teor de C atinge a linha A_{cm} , calculada em paraequilíbrio e extrapolada abaixo de A_{e1} , inicia-se a formação de perlita. A precisão do cálculo de frações formadas foi considerada satisfatória, na maioria dos casos dentro de $\pm 5\%$, tendo em vista a complexidade da microestrutura obtida e os erros inerentes à análise da microestrutura.

A microestrutura da amostra da bobina industrial foi constituída de ferrita aproximadamente poligonal e perlita, com tamanho de grão ferrítico de $3,7 \mu\text{m}$ e dureza de 203 HV. A fração de ferrita foi de 76,1%. As microestruturas dos ensaios laboratoriais apresentaram, além dos componentes acima, alguma ferrita acicular. A dureza, para taxas de resfriamento de 5 e 10°C/s , situou-se entre 210 e 230 HV, e o tamanho de grão ferrítico foi cerca de $7 \mu\text{m}$. As frações de ferrita variaram entre 60 e 81%.

Foi demonstrado que a diferença de microestrutura dos ensaios laboratoriais para a bobina deve-se ao maior condicionamento da austenita abaixo da temperatura de não-recristalização e ao menor tamanho de grão austenítico recristalizado no processo industrial. Demonstrou-se ainda que o modelo integrado desenvolvido, quando extrapolado para as condições industriais, forneceu previsões de microestrutura e dureza próximas daquela observada na bobina. Para previsão do tamanho de grão ferrítico foi

selecionada uma equação de literatura, que forneceu melhor previsão dos valores medidos nos ensaios laboratoriais e no processo industrial.

Diante das conclusões acima, pode-se afirmar que os objetivos geral e específicos colocados para este trabalho foram atingidos.

13. CONTRIBUIÇÕES ORIGINAIS E RELEVÂNCIA DOS RESULTADOS

A principal contribuição original deste trabalho é a realização de ensaios, sua interpretação e o desenvolvimento de um modelo de cinética de decomposição da austenita, para a condição em que a transformação transcorre em dois regimes de resfriamento contínuo, um em alta taxa e outro em baixa taxa.

Outra contribuição original foi o estabelecimento de uma relação entre as constantes que descrevem o parâmetro b da equação de Avrami, quando aplicada juntamente com a regra da aditividade, para o modelamento da transformação.

Foi ainda dada uma interpretação para tais constantes, mostrando que outras definições para b seriam também possíveis, sem prejudicar o ajuste do modelo. Foi considerado especificamente o caso em que b é modelado por uma função do tipo Arrhenius.

Uma outra contribuição deste trabalho, não encontrada na literatura, é a aplicação do modelo integrado desenvolvido para as condições de processamento industrial do aço, obtendo-se resultados satisfatórios.

Os resultados deste trabalho são relevantes devido, principalmente, a: (i) geração de base de conhecimentos sobre os mecanismos, a cinética e o modelamento da transformação de fases de aços microligados, em condições de resfriamento típicas do processo de laminação em tiras a quente; (ii) possibilidade de aplicação do modelo desenvolvido, com os devidos ajustes, de forma acoplada a modelos de controle de resfriamento, visando melhorar o acerto de temperatura de bobinamento; (iii) estabelecimento de submodelos como pré-requisitos para o desenvolvimento de modelos integrados de previsão de propriedades mecânicas dos aços laminados a quente.

14. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Extensão do modelo aqui desenvolvido para outros aços microligados processados em tiras a quente.
- Desenvolvimento de um modelo matemático de simulação do resfriamento da tira acoplado ao modelo de transformação de fases ao de transferência de calor.
- Desenvolvimento de modelos de transformação da austenita em aços avançados, tipos bifásico e *trip*.
- Investigação detalhada das microestruturas resultantes da decomposição da austenita do aço estudado, por meio de recursos avançados de microscopia eletrônica de transmissão.
- Estudo da precipitação de carbonitretos durante a transformação da austenita e, posteriormente na ferrita, após o bobinamento, para o aço estudado.
- Desenvolvimento de modelos matemáticos para previsão das propriedades mecânicas de tração e tenacidade, para o aço aqui estudado, considerando-se a transformação de fases nos aços microligados de alta resistência.

15. PUBLICAÇÕES RELACIONADAS COM O TRABALHO

- SANTOS, A. A. Previsão das Temperaturas Críticas de Decomposição da Austenita em Ferrita e Perlita durante Resfriamento Contínuo. In: 41º SEMINÁRIO DE LAMINAÇÃO ABM, v. 41, 2004, Joinville/SC, p.293-302.
- SANTOS, A. A.; MELO, T. M. F. Modelamento da Cinética de Transformação de Aços CMn durante Resfriamento Contínuo através de Equações Semi-Empíricas. In: 60º CONGRESSO ANUAL DA ABM, v. 60, 2005, Belo Horizonte/MG.
- SANTOS, A. A.; MELO, T. M.F.; RODRIGUES, C. F. Desenvolvimento de Modelos para Previsão da Microestrutura de Aços CMn após Resfriamento Contínuo. In: 41º SEMINÁRIO DE LAMINAÇÃO ABM, v. 42, 2005, Santos/SP, p.386-395.
- SANTOS, A. A.; MARRA, K. M. Método de Determinação da Cinética de Transformação de Fases a Partir de Curvas Dilatométricas. In: 61º CONGRESSO ANUAL DA ABM, v. 61, 2007, Rio de Janeiro/RJ.
- SANTOS, A. A.; BARBOSA, R. Modeling Austenite-to-Ferrite Transformation Kinetics in Low-Carbon Manganese Steels during Continuous Cooling. In: THERMEC 2006, Vancouver/Canada.

16. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1) HODGSON, P. D. Microstructure Modelling for Property Prediction and Control. **Journal of Mat. Proc. Technol.**, v. 60, p.27-33, 1996.
- 2) DÖLL, R.; SÖRGEL, G.; ORTMANN, B.; DAUM, M. Controlling Mechanical Properties with Microstructure Monitoring. **Metals Mining and More**, p.4, 1998.
- 3) SAITO, Y. Modelling of Microstructural Evolution in Thermomechanical Processing of Structural Steels. **Mat. Science and Eng. A223**, p.134-145, 1997.
- 4) VENKATRAMAN, M.; MOHANTY, O. N. Prediction of Microstructure and Mechanical Properties of Hot Rolled Low Carbon Steel Strips. In: 41st MWSP CONF. PROC., v. 37, 1999, p.717-732.
- 5) TORIZUKA, S.; OHKOUCHI, N.; MINOTE, T.; NIIKURA, M.; OUCHI, C. An Integrated Model for Microstructural Evolution and Properties Prediction in the Hot Strip Mill. In: THERMOMECHANICAL PROCESSING THEORY, MODELLING AND PRACTICE, ed. by B. Hutchinson et al. ASM, Sweden, 1996, p. 227-239.
- 6) SUEHIRO, M. Predição das Propriedades Mecânicas e Evolução da Microestrutura das Chapas de Aço Laminadas a Quente, Curso Técnico em homenagem ao Dr. Nishiyama, NSC, dez./2000 (em japonês).
- 7) SUEHIRO, M.; SENUMA, T.; YADA, H.; MATSUMARA, Y.; ARIYOSHI, T. Modelamento Cinético das Transformações de Fases do Aço Comum de Baixo Teor de Carbono Durante o Resfriamento Contínuo, **Tetsu-to-Hagané**, ano 73, v. 8, p.109-117, 1987.
- 8) CAMPBELL, P. C.; HAWBOLT, E. B.; BRIMACOMBE, J. K. Microstructural Engineering Applied to the Controlled Cooling of Steel Wire Rod: Part II. Microstructural Evolution and Mechanical Properties Correlations. **Met. Trans. A**, v. 22A, p.2779-90, November/1991.

- 9) KUMAR, A.; MCCULLOCH, C.; HAWBOLT, E. B.; SAMARASEKERA, I.V. Modelling Thermal and Microstructural Evolution on Runout Table of Hot Strip Mill, **Mat. Science and Technol.**, v. 7, p.360-368, April/1991.
- 10) HAN, H. N.; LEE, J. K.; KIM, H. J.; JIN, Y. S. A Model for Deformation, Temperature and Phase Transformation Behavior of Steels on Run-Out Table in Hot Strip Mill. **Journal of Mat. Proc. Technology**, v. 128, p.216-225, 2002.
- 11) PRIETO, M. M.; RUÍZ, L. S.; MENÉNDEZ, J. A. Thermal Performance of Numerical Model of Hot Strip Mill Runout Table. **Ironmaking and Steelmaking**, v. 28, n. 6, p.474-480, 2001.
- 12) EVANS, J. F.; ROEBUCK, I. D.; WATKINS, H. R. Numerical Modeling of Hot Strip Mill Runout Table Cooling. **Iron and Steel Eng.**, p.50-55, January/1993.
- 13) MILITZER, M.; HAWBOLT, E. B.; MEADOWCROFT, T. R. Microstructural Model for Hot Strip Rolling High-Strength Low-Alloy Steels. **Met. Trans. A**, v. 31A, p.1247-1259, April/2000.
- 14) IUNG, T.; KANDEL, M.; QUIDORT, D.; LASSAT, Y. Physical Modelling of Phase Transformations in High Strength Steels. **Revue de Métallurgie**, p.173-181, Février/2003.
- 15) SANTOS, A. A. Previsão das Temperaturas Críticas de Decomposição da Austenita em Ferrita e Perlita durante Resfriamento Contínuo. In: 41° SEMINÁRIO DE LAMINAÇÃO ABM, v. 41, 2004, Joinville/SC, p.293-302.
- 16) SANTOS, A. A.; MELO, T. M. F. Modelamento da Cinética de Transformação de Aços CMn durante Resfriamento Contínuo através de Equações Semi-Empíricas. In: 60° CONGRESSO ANUAL DA ABM, v. 60, 2005, Belo Horizonte/MG.
- 17) SANTOS, A. A.; MELO, T. M.F.; RODRIGUES, C. F. Desenvolvimento de Modelos para Previsão da Microestrutura de Aços CMn após Resfriamento Contínuo. In: 41° SEMINÁRIO DE LAMINAÇÃO ABM, v. 42, 2005, Santos/SP, p.386-395.
- 18) VITEK, J. M.; BABU, S. S.; KOZESCHNIK, E. A Study of the Transition Kinetics from Para-Equilibrium to Ortho-Equilibrium. In: MATERIALS SCIENCE AND

- TECHNOLOGY 2003, CONF. PROCEEDINGS, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.139-148.
- 19) PANDI, R.; MILITZER, M.; HAWBOLT, E. B. Effect of Cooling and Deformation on the Austenite Decomposition Kinetics. In: 37ND MWSP CONF. PROC., ISS, v. XXXIII, 1996, p.635-643.
- 20) ZHAO, J. Z.; MESPLONT, C.; COOMAN, B. C. Kinetics of Phase Transformations in Steels: A New Method for Analysing Dilatometric Results. **ISIJ Int**, v. 41, n. 5, p.492-497, 2001.
- 21) DOHERTY, R. D. **Diffusive Phase Transformations in the Solid State**. In: PHYSICAL METALLURGY, R. W. Cahn and P. Hansen eds., Elsevier Science Publishers BV, 1981.
- 22) PAN, Y. T. **Measurement and Modelling of Diffusional Transformation of Austenite on C-Mn Steels**. PhD Thesis, National Sun Yat-Sen University, Kaoshiung, Taiwan, June/2001, p. 23.
- 23) SAKUMA, T.; HONEYCOMBE, R. W. K. Effect of Manganese on Microstructure of an Isothermally Transformed Fe-Nb-C Alloy, **Mat. Science and Technol.**, v. 1, p.351-356, May/1985.
- 24) HUTCHINSON, C. R.; FUCHSMANN, A.; ZUROB, H.; BRÉCHET, Y. The Diffusional Formation of Allotriomorphic Ferrite in Fe-C-X Systems. The Simplest Case: Fe-C-Ni. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p. 49-63.
- 25) GAMSJÄGER, E.; FISCHER, F. D. Influence of Substitutional Alloying Elements on the Austenite-Ferrite Transformation in Iron-Alloys. In: INT. SYMP. ON TRANSFORMATION AND DEFORMATION MECHANISMS IN ADVANCED HIGH-STRENGTH STEELS, 2003, Vancouver/Canada.
- 26) GUPTA, S. P. Kinetics of Ferrite Transformation in an HSLA Steel Containing Nb. **Mat. Steel Research**, v. 64, n. 12, p.623-629, 1993.

- 27) KAMAT, R. G.; HAWBOLT, E. B.; BROWN, L. C.; BRIMACOMBE, J. K. The Principle of Additivity and the Proeutectoid Ferrite Transformation. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 23A, p.2469-2480, September/1992.
- 28) ZENER, C. Kinetics of the Austenite Decomposition. **Trans. AIME**, v. 167, p.550-595, 1946.
- 29) HILLERT, M. The Role of Interfacial Energy during Solid State Phase Transformations. **Jerkontorets Annaler**, v. 141, p.757-789, 1957.
- 30) HILLERT, M. Diffusion and Interface Control of Reactions in Alloys. **Metal. Trans. A**, v. 6A, p.5-19, January/1975.
- 31) KAUFMAN, L.; RADCLIFFE, S. V.; COHEN, M. Thermodynamics of the Bainite Reaction. In: DECOMPOSITION OF AUSTENITE BY DIFFUSIONAL PROCESSES, eds. V. F. Zackay and H. I. Aaronson, Interscience Publishers, New York, 1962, p.313-352.
- 32) HILLERT, M. The Formation of Pearlite. **Trans. AIME**, p.197-247, 1951.
- 33) AARONSON, H. I. The Proeutectoid Ferrite and the Proeutectoid Cementite Reactions. In: Proc. Symp. on DECOMPOSITION OF AUSTENITE BY DIFFUSIONAL PROCESSES, USA, Philadelphia, AIME, October/1960, p.387-548. (Citado por ALÉ, R. M. Tese de Doutorado, UFRJ, dezembro/1994, p.28-29).
- 34) BHADESHIA, H. K. D. H. Modelling of Steel Welds. **Mat. Science and Technol.**, v. 8, p.123-133, February/1992.
- 35) HILLERT, M.; PURDY, G. R. On the Misuse of the Term Bainite, **Scripta Materialia**, v. 43, p.831-833, 2002.
- 36) KRAUSS, G.; THOMPSON, S. W. Ferritic Microstructures in Continuously Cooled Low-and Ultra-low Carbon Steels. **ISIJ Int.**, v. 35, n. 8, p.937-945, 1995.
- 37) THOMPSON, S. W.; COLVIN, D. J.; KRAUSS, G. Austenite Decomposition during Continuous Cooling of an HSLA Plate Steel. **Met. Trans. A**, v. 27A, p.1557-1571, June/1996.
- 38) CIZEK, P.; WYNNE, B. P.; DAVIES, C. H.; MUDDLE, B. C.; HODGSON, P. D. Effect of Composition and Deformation on the Transformation Characteristics of

- Low-Carbon and Ultra-Low Carbon Microalloyed Steels. **Met. Trans. A**, v. 33A, p.1331-1349, May/2002.
- 39) VENKATRAMAN, M.; MAJUMDAR, S.; MOHANTY, O. N. Modelling of Strength and Continuous Cooling Transformation Behaviour of HSLA 100 Plate Steel. **Ironmaking and Steelmaking**, v. 28, n. 5, p.373-383, 2001.
- 40) YAMAMOTO, S.; YOKOYAMA, H.; YAMADA, K.; NIIKURA, M. Effects of Grain Size and Deformation in the Unrecrystallized Austenite Region on Bainite Transformation Behaviour and Microstructure. **ISIJ Int.**, v. 35, n. 8, p.1020-1026, 1995.
- 41) IUNG, T.; KANDEL, M.; LACROIX, S.; PERLADE, A.; QUIDORT, D. Prediction of Phase Transformation Kinetics and Microstructures in Low-Carbon High Strength Steels. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.257-266.
- 42) SUNDMAN, B. Computer Prediction of Para-Equilibrium Transformations. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.113-120.
- 43) HACKENBERG, R. E.; SHIFLET, G. J. Non-Equilibrium Reaction Paths in Ferrous Austenite Decomposition. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.149-166.
- 44) ÄGREN, J. A Deviation from Local-Equilibrium During Austenite to Ferrite Transformation. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.167-178.
- 45) INDEN, G.; HUTCHINSON, C. R. Interfacial Conditions at the Moving Interface during Growth of Ferrite from Austenite in Fe-C-(X) Alloys. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.65-80.

- 46) HILLERT, M.; STAFFANSON, L. I. The Regular Solution Model for Stoichiometric Phases and Ionic Melts. **Acta Chem. Scand.**, v. 24, n. 10, p. 3618-1326, 1970.
- 47) ENOMOTO, M.; AARONSON, H. I. Calculation of $\alpha + \gamma$ Phase Boundaries in the Fe—X Systems from the Central Atoms Model. In: CALPHAD, v. 9, n. 1, 1985, p. 43-58.
- 48) KIRKALDY, J. S.; BAGANIS, E. A. Thermodynamic Prediction of the A_{e3} Temperature of Steels with Additions of Mn, Si, Ni, Cr, Mo, Cu. **Metal. Trans. A**, v. 9A, , p.495-501, April/1978.
- 49) SHIFLET, G. J.; BRADLEY, J. R.; AARONSON, H. I. A Re-examination of the Thermodynamics of the Proeutectoid Ferrite Transformation in Fe-C Alloys. **Metal. Trans. A**, v. 9, p.999-1008, July/1978.
- 50) ENOMOTO, M. Prediction of TTT-diagram of Proeutectoid Ferrite Reaction in Iron Alloys from Diffusion Growth Theory. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.297-305, 1992.
- 51) KIRKALDY, J. S. Prediction of Alloy Hardenability from Thermodynamic and Kinetic Data. **Metal. Trans.**, v. 4, p.2327-2333, October/1973.
- 52) KIRKALDY, J. S.; THOMPSON, B. A.; BAGANIS, E. A Prediction of Multicomponent Equilibrium and Transformation Diagrams for Low Alloy Steels. In: HARDENABILITY CONCEPTS WITH APPLICATIONS TO STEEL, ed. D. V. Doane e J. S. Kirkaldy, The Metallurgical Soc. of AIME, 1978, p.82-125.
- 53) PANDI, R.; MILITZER, M.; HAWBOLT, E. B.; MEADOWCROFT, T. R. Modelling of Austenite Decomposition Kinetics in Nb Steel During Run-Out Table Cooling. In: HSLA STEELS'95 INT. CONF. ON HSLA STEELS, 3, Beijing, 1995, p.265-270.
- 54) MILITZER, M.; HAWBOLT, E. B.; MEADOWCROFT, T. R. Prediction of the Ferrite Grain Size in Low Carbon Steels. In: HSLA STEELS'95 INT. CONF. ON HSLA STEELS, 3, Beijing, 1995, p.271-276.
- 55) PANDI, R.; MILITZER, M.; HAWBOLT, E. B. Effect of Cooling and Deformation on the Austenite Decomposition Kinetics. In: 37nd MWSP CONF. PROC., ISS, v. XXXIII, 1996, p.635-43.

- 56) MILITZER, M.; PANDI, R.; HAWBOLT, E. B. Ferrite Nucleation and Growth During Continuous Cooling. **Met. Trans. A**, v. 27A, p.1547-1556, June/1996.
- 57) LI, M. V.; NIEBUHR, D. V.; MEEKISHO, L. L.; ATTERIDGE, D. G. A Computation Model for the Prediction of Steel Hardenability. *Met. Mater. Trans.*, v. 29B, p.661-672, June/1998.
- 58) UHRRENIUS, B. A Compendium of Ternary Iron-Base Phase Diagrams. In: HARDENABILITY CONCEPTS WITH APPLICATIONS TO STEEL, ed. D. V. Doane e J. S. Kirkaldy, The Metallurgical Soc. of AIME, 1978, p.28-47.
- 59) QIU, C.; SIETSMA, J.; Van Der ZWAAG, S. Ferrite Growth from Austenite in C-Mn Steels During Continuous Cooling. **Ironmaking and Steelmaking**, v. 26, n. 3, p.200-204, 1999.
- 60) MESPLONT, C.; ZHAO, J. Z.; VANDEPUTTE, S.; COOMAN, B. C. An Improved Method for Determining the Continuous Cooling Transformation Diagram of C-Mn Steels. **Steel Research**, v. 72, n.7, p.263-270, 2001.
- 61) PIETRZYK, M.; KUZIAK, R.; KONDEK, T. Physical and Numerical Modelling of Plastic Deformation of Steels in Two-Phase Region. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation And Decomposition, Conf. Proceedings, Chicago, 2003, p.209-220.
- 62) FAZELI, F.; MILITZER M. Modelling the Formation of Bainitic Ferrite in Low-Carbon Steels. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Modeling, Control and Optimization in Nonferrous and Ferrous Industry, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.469-480.
- 63) Van LEEUWEN, Y.; ONINK, M.; SIETSMA, J.; Van Der ZWAAG, S. The γ/α Transformation under Ultra-fast Cooling Conditions. **ISIJ Int.**, v. 41, n. 9, p.1037-1046, 2001.
- 64) MONTES, C. C. **Modeling of Diffusional Phase Transformation during the Isothermal Decomposition of Austenite in a Carbon Manganese Microalloyed with Vanadium and Titanium**. PhD Thesis. Cambridge/UK, 2001.

- 65) MIETTINEN, J. Simple Semiempirical Model for Prediction of Austenite Decomposition and Related Heat Release During Cooling of Low Alloyed Steels. **Ironmaking and Steelmaking**, v. 23, n. 4, p.346-356, 1996.
- 66) BRADLEY, J. R.; AARONSON, H. I. Growth Kinetics of Grain Boundary Ferrite Allotriomorphs in Fe-C-X Alloys. **Met. Trans. A**, v. 12A, p.1729-1741, October/1981.
- 67) ASM Handbook, v. 4, Heat Treating of Steel. December/1994.
- 68) KIRKALDY, J. S.; VENUGOPALAN, D. Prediction of Microstructure and Hardenability in Low Alloy Steels. In: PHASE TRANSFORMATIONS IN FERROUS ALLOYS, Conf. Proc., Philadelphia, October/1983, p.125-148.
- 69) HAWBOLT, E. B.; CHAU, B.; BRIMACOMBE, J. K. Kinetics of Austenite-Ferrite and Austenite-Pearlite Transformations in a 1025 Carbon Steel. **Metal. Trans. A**, v. 16A, p.565-578, April/1985.
- 70) PHAM, T. T.; HAWBOLT, E. B.; BRIMACOMBE, J. K. Predicting the Onset of Transformation under Noncontinuous Cooling Conditions: Part I. Theory. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 26A, p.1987-1992, August/1995.
- 71) YE, J. S.; HSU, T. Y. Modification of the Additivity Hypothesis with Experiment. **ISIJ Int.**, v. 44, n. 4, p. 777-779, 2004.
- 72) FANG, L.; WOOD, W. E.; ATTERIDGE, D. G. Identification and Range of Quantification of Steel Transformation Products by Transformation Kinetics. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 28A, p.5-14, January/1997.
- 73) PHAM, T. T.; HAWBOLT, E. B.; BRIMACOMBE, J. K. Predicting the Onset of Transformation under Noncontinuous Cooling Conditions: Part II. Application to the Austenite to Pearlite Transformation. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 26A, p.1993-2000, August/1995.
- 74) WIERSZLLOWSKI, I. A. The Effect of the Thermal Path to Reach Isothermal Temperature on Transformation Kinetics. **Metal. Trans. A**, v. 22A, p.993-999, May/1991.

- 75) RUSSEL, K. C. Precipitate Coarsening and Grain Growth in Steels. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation and Decomposition, Conf. Pro, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.437-456.
- 76) LANGE, W. F.; ENOMOTO, M.; AARONSON, H. I. Precipitate Nucleation Kinetics at Grain Boundaries. **Int. Mat. Reviews**, v. 34, n. 3, p.125-150, 1989.
- 77) AARONSON, H. I.; LEE, J. K. The Kinetic Equations of Solid-Solid Nucleation Theory. In: Lectures on the Theory of Phase Transformations. The Metallurgical Soc. of AIME, ed. H. I. Aaronson, 1982, p.83-115.
- 78) PRIESTNER, R.; AL-BADRI, A.M.A. Ferrite Grain Coarsening during the Transformation of Deformed Austenite. In: HSLA'95 STEELS - INT. CONF., Beijing, 1995, p. 231-236.
- 79) ISHIKAWA, F.; TAKAHASHI, T.; OCHI, TATSUROU. Intragranular Ferrite Nucleation on Medium-Carbon Vanadium Steels. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 25A, p.929-936, May/1994.
- 80) SUEHIRO, M.; SATO, K.; TSUKANO, Y.; YADA, H.; SENUMA, T.; MATSUMARA, Y. Computer Modeling of Microstructural Change and Strength of Low carbon Steel in Hot Strip Rolling. **Trans. ISIJ**, v. 27, p.439-445, 1987.
- 81) SUEHIRO, M.; SENUMA, T.; YADA, H.; SATO, K. Application of Mathematical Model for Predicting Microstructural Evolution of High Carbon Steels. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.433-439, 1992.
- 82) SUEHIRO, M.; YADA, H.; SATO, K.; SENUMA, T. Mathematical Model for Predicting Transformations of Hypoeutectoid Steels. In: SIMULATION AND THEORY OF EVOLVING MICROSTRUCTURES, ed. M. P. Anderson and A. D. Rollet, The Minerals, Metals and Materials Society, 1990, p.189-196.
- 83) SENUMA, T.; SUEHIRO, M.; YADA, H. Mathematical Models for Predicting Microstructural Evolution and Mechanical Properties of Hot strip Strips. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p. 423-32, 1992.
- 84) SUEHIRO, M.; SENUMA, T.; ODA, T.; KONISHI, S. Development of Mathematical Model for Predicting Transformation of High-Carbon Steel During

- Cooling on Runout Table and its Application to On-line Temperature Control of Hot Strip Mill. **NSC Techn. Report**, n. 67, p.49-56, October/1995.
- 85) YOSHIE, A.; FUJIOKA, M.; WATANABE, Y.; NISHIOKA, K.; MORIKAWA, H. Modelling of Microstructural Evolution and Mechanical Properties of Steel Plates Produced by Thermo-Mechanical Control Process. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.395-404, 1992.
- 86) LIU, J.; YANAGIDA, A.; SUGIYAMA, S.; YANAGIMOTO, J. The Analysis of Phase Transformation for the Prediction of Microstructure Change after Hot Forming. **ISIJ Int.**, v. 41, n. 12, p.1510-1516, 2001.
- 87) YANAGIMOTO, J.; MORIMOTO, T.; KURAHASHI, R.; CHIKUSHI, I. Mathematical Modelling for Rolling Force and Microstructure Evolution and Microstructure Controlling with Heavy Reduction in Tandem Hot Strip Rolling. **Steel Research**, v. 73, n. 2, p.56-62, 2002.
- 88) UMEMOTO, M.; HIRAMATSU, A.; MORYIA, A.; WATANABE, T.; NANBA, S.; NAKAJIMA, N.; ANAN, G.; HIGO, Y. Computer Modelling of Phase Transformation from Work-hardened Austenite. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.306-315, 1992.
- 89) VERHOEVEN, J. D. **Fundamentals of Physical Metallurgy**. Jonh Wiley & Sons,, 1975, p.217-226.
- 90) KOLMOGOROV, A. N. Sobre a Teoria Estatística da Cristalização de Metais (apresentado pelo acadêmico S. N. Bernshtein). **Belluteni Akademii Nauk SSSR**, p.355, 1937.
- 91) CAHN, J. W. The Kinetics of Grain Boundary Nucleated Reactions. **Acta Metall.**, v. 4, p.449-459, September/1956.
- 92) TAMURA, I. A Role of Thermomecahnical Processing of Austenite on Ferrite Grain Refinement. In: INT. CONF. ON PHYSICAL METALLURGY OF THERMO-MECHANICAL PROCESSING OF STEELS AND OTHERS METALS - THERMEC 88, p.1-10.

- 93) JONES, S. J.; BHADSHIA, H. K. D. H. Kinetics of the Simultaneous Decomposition of Austenite into Several Transformation Products. **Acta Mater.**, v. 45, . 2911-2920, 1997.
- 94) KWON, O. Metallurgical Modelling of Microstructural Changes in Nb Microalloyed Steels. Palestra proferida na USIMINAS, Ipatinga, MG, julho/1998.
- 95) MARRA, K. M.; MELO, T. M. F. Previsão de Curvas de Fluxo sob Compressão na Região Intercrítica para um aço Silicioso. In: 44º SEMINÁRIO DE LAMINAÇÃO ABM, v. 44, 2007, Campos do Jordão/SP.
- 96) HICKSON, M. R.; HURLEY, P. J.; GIBBS, R. K.; KELLY, G. L.; HODGSON, P. D. The Production of Ultrafine Ferrite in Low-Carbon Steel by Strain-Induced Transformation. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 33A, p.1019-1026, April/2002.
- 97) LEE, S.; KWON, D.; LEE, Y. K.; KWON, O. Transformation Strengthening by Thermomechanical Treatments in C-Mn-Ni-Nb Steels. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 26A, p.1093-1099, May/1995.
- 98) SICILIANO JR, F. **Mathematical Modeling of the Hot Strip Rolling of Nb Microalloyed Steels**. PhD Thesis, McGill University, Montreal, Canada, February/1999, p. 144.
- 99) JIANG, L.; HUMPRHEYS, A. O.; JONAS, J. J. Effect of Silicon on the Interaction between Recrystallization and Precipitation in Niobium Microalloyed Steels. **ISIJ Int.**, v. 44, n. 2, p.381-387, 2004.
- 100) COTA, A B. **Simulação da Laminação Controlada e Resfriamento Acelerado em um Aço ARBL Bainítico de Baixo Carbono através de Ensaio de Torção**. Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Minas - UFMG, Belo Horizonte, 1998.
- 101) WU, J.; WRAY, P. J.; HUA, M.; GARCIA, C. A.; DeARDO, A. Microstructure Characterization on the Austenite Decomposition of HSLA Steel Strip. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation and Decomposition, Conf. Pro, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.291 - 309.
- 102) GAO, W.; GARCIA, C. A.; DeARDO, A. The Nucleation of Ferrite from a CoarseGrained Austenite during Slow Continuous Cooling of na HSLA Steel. In:

- MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - 45th MWSP, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.243 - 255.
- 103) LIU, S. K.; YANG, L.; ZHU, D. G.; ZHANG, J. The Influence of the Alloying Elements upon the Transformation Kinetics and Morphologies of Ferrite Plates in Alloy Steels. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 25A, p.1991-2000, September/1994.
- 104) TAMURA, I.; OUCHI, C.; TANAKA, T.; SEKINE, H. Thermomechanical Processing of High Strength Low Alloy Steels. London, Butterworths, 1988, p.162.
- 105) KVACKAJ, T.; MAMUZIC, I. A. Quantitative Characterization of Austenite Microstructure after Deformation in Nonrecrystallization Region and its Influence on Ferrite Microstructure after Transformation. **ISIJ Int.**, v. 38, n. 11, p.1270-1276, 1998.
- 106) MILITZER, M. Challenges in Modeling the Overall Austenite Decomposition Kinetics. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation and Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.195-212.
- 107) LACROIX, S.; BRÉCHET, Y.; QUIDORT, D.; KANDEL, M.; IUNG, T. Influence of Deformation on Austenite to Ferrite Transformation in Low Carbon Steels: Experimental Approach and Modelling. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Austenite Formation and Decomposition, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.367-378.
- 108) MANOHAR, P. A.; CHANDRA, T.; KILLMORE, C. R. Effect of Cooling and Deformation on the Austenite Decomposition Kinetics. **ISIJ Int.**, v. 36, n. 12, p. 1486-1493, 1996.
- 109) BAI, D. Q.; YUE, S.; SUN, W. P.; JONAS, J. J. Effect of Deformation Parameters on the No Recrystallization Temperature in Nb-Bearing Steels. **Met. Trans. A**, v. 24A, p.2151-2159, October/1993.
- 110) KHLESTOV, V. M.; KONOPLEVA, E. V.; McQUEEN, H. J. Effect of Deformation in Controlled Rolling on Ferrite Nucleation. **Can. Met. Quartely**, v. 40, n. 2, p.221-234, 2001.

- 111) BENGOCHEA, R.; LÓPEZ, B.; GUTIERREZ, I. Influence of the Prior Austenite Microstructure on the Transformation Products Obtained for C-Mn-Nb Steels after Continuous Cooling. **ISIJ Int.**, v. 39, n. 3, p.583-591, 1999.
- 112) NAKATA, N.; MILITZER, M. Microstructure Evolution of a State-of-the-Art Ti-Nb HSLA Steel. In: 42nd MWSP CONF. PROC., ISS, v. XXXVIII, 2000, p.813-824.
- 113) NAKATA, N.; MILITZER, M. Modelling of Microstructure Evolution during Hot Rolling of a 780 MPa High Strength Steel. **ISIJ Int.**, v. 45, n. 1, p.82-90, 2005.
- 114) PERELOMA, E.; BOYD, J. D. Effects of Simulated on line Accelerated Cooling Processing on Transformation Temperatures and Microstructure in Microalloyed Steels Part I - Strip Processing. **Mat. Science and Technol.**, v. 12, p.1808-1817, October/1996.
- 115) DONNAY, B.; HERMAN, J. C.; LEROY, V.; LOTTER, U.; GROSSTERLINDEN, R.; PIRCHER H. Microstructure Evolution of C-Mn Steels in the Hot Deformation Process: the Stripcam Model. In: 2nd INT. CONF. ON MODELLING OF METAL ROLLING PROCESSES, The Institute of Materials, London, 1996, p. 23-35.
- 116) DEBRAY, B.; TERACHER, P.; JONAS, J. J. Simulation of the Hot Rolling and Accelerated Cooling of a C-Mn Ferrite-Bainite Strip Steel. **Met. Trans. A**, v. 26A, p.99-111, January/1995.
- 117) THOMSON, M.; FERRY, M.; MANOHAR, P. A. Simulation of Hot Band Microstructure of C-Mn Steels During High Speed Cooling. **ISIJ Int.**, v. 41, n. 5, p.891-899, 2001.
- 118) LEE, K. J.; LEE, J. K.; KANG, L. B.; KWON, O. Mathematical Modelling of Transformation in Nb Microalloyed Steels. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.326-234, 1992.
- 119) MAJTA, J.; ZUREK, A K.; COLA, M.; HOCHANDEL, P.; PIETRZYK, M. An Integrated Computer Model with Applications for Austenite-to-Ferrite Transformation during Hot Deformation of Nb-Microalloyed Steels. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 33A, p.1509-1520, May/2002.

- 120) BÜHLER, M.; GOMEZ, G. R.; PEREZ, T. Study of the Austenite Decomposition in Low Carbon Steels with Microalloys Additions. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - 45th MWSP, Conf. Proceedings, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.257-267.
- 121) COTA, A. B.; LACERDA, A. M.; OLIVEIRA, F. L. G.; ARAÚJO, F. G. S. Influência da Temperatura de Austenitização sobre a Cinética de Formação da Ferrita em um Aço Microligado ao Nb. **Revista da Escola de Minas**, v. 55, n. 4, p.273-277, out-dez/2002.
- 122) PALMIERE, E. J.; GARCIA, C. I.; DeARDO, A. J. Suppression of Static Recrystallization in Microalloyed Steels by Strain-Induced Precipitation. In: INT. SYMPOSIUM ON LOW-CARBON STEELS FOR THE 90'S, eds R. Ashahani and G. Tither, TMS, 1993, p.121-130.
- 123) PRIESTNER, R.; HODGSON, P. D. Ferrite Grain Coarsening during Transformation of Thermomechanically Processed C-Mn-Nb Austenite. **Mat. Science and Technol.**, v. 8, p.849-854, October/1992.
- 124) ELDIS, G. T. A Critical Review of Data Sources for Isothermal Transformation and Continuous Cooling Transformation Diagrams. In: HARDENABILITY CONCEPTS WITH APPLICATIONS TO STEEL, ed. D. V. Doane e J. S. Kirkaldy, The Metallurgical Soc. of AIME, 1978, p.126-157.
- 125) PRIOR, G. K. The Role of Dilatometry in the Characterisation of Steels. **Mat. Forum**, v. 18, p.265-276, 1994.
- 126) TALARICO, M. L.; OLIVEIRA, N. J. L. Determinação de Temperaturas de Transformação de Fases com Aplicação de Deformações. In: 55º CONGRESSO ANUAL DA ABM, v. 60, 2005, Rio de Janeiro/RJ.
- 127) LIU, X.; SOLBERG, J. K.; GJENGEDAL, R. Torsion Simulation of the $\gamma \rightarrow \alpha$ Transformation Kinetics after Multi-Pass Deformation of Steels. In: HSLA STEELS'95 INT. CONF. ON HSLA STEELS, 3, Beijing, 1995, p.253-258.
- 128) PAPAELIAS, M. P.; STRANGWOOD, M.; PEYTON, A. J.; DAVIES. C. L. Measurement and Modeling of the Electromagnetic Response to Phase Transformation in Steels. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 35A, p.965, March/2004.

- 129) MEDINA, S. F.; VEJA, M. I.; CHAPA, M. Critical Cooling Temperatures and Phase Transformation Kinetics in Structural Steels Determined by Mean Flow Stress and Dilatometry. **Mat. Sci. and Technol.**, v. 16, , p.163-170, February/2000.
- 130) GÓMEZ, M.; HERNANDEZ, O.; MEDINA, S.; TARÍN, P. Determination of Residual Stress and Critical Rolling Temperatures in a Microalloyed Steel with Low Carbon and Niobium Contents. **Steel Research**, v. 73, n. 10, p.446-452, 2002.
- 131) HULTGREN, A. Isothermal Transformation of Austenite. **Trans. ASM**, v. 39, p.915-1005, 1947.
- 132) GOMEZ, T.; PÉREZ, T. Modelling the Microstructural Evolution During Hot Strip Rolling. In: 44th MWSP CONF. PROC., ISS, vol. XXXX, 2002.
- 133) ONINK, M.; TICHELAAR, F. D.; BRAKMAN, C. M.; MITTEMEIJER, E. J.; Van der ZWAAG, S. Quantitative Analysis of the Dilatation by Decomposition of Fe-C Austenites; Calculation of Volume Change upon Transformation. **Z. Metall.**, v. 87, p.24-32, 1996.
- 134) KOP, T. A.; SIETSMA, J.; Van Der ZWAAG, S. Modelling the Austenite to Ferrite Phase Transformation in Low Carbon Steels in Terms of the Interface Mobility. *ISIJ Int.*, v. 40, n. 7, p.713-718, 2000.
- 135) ZHAO, J. Z.; MESPLONT, C.; COOMAN, B. C. Calculation of the Phase Transformations Kinetics from a Dilatation Curve. **Journal of Mat. Proc. Technology**, v. 129, p.345-348, 2002.
- 136) CHOI, S. Model for Estimation Transformation Kinetics from the Dilatation Data during a Cooling of Hypoeutectoid Steels. **Journal of Mat. Proc. Technology**, v. A363, p.72-80, 2003.
- 137) GÓMEZ, M.; MEDINA, S. F.; CARUANA, G. Modelling of Phase Transformation by Correction Dilatometry Results for a Ferritic Nb-microalloyed Steel, *ISIJ Int.*, v. 43, n. 8, p.1228-1237, 2003.
- 138) HAWBOLT, E. B.; CHAU, B.; BRIMACOMBE, J. K. Kinetics of Austenite-Pearlite Transformation in Eutectoid Carbon Steel. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 14A, p.1803-1815, September/1983.

- 139) KUBAN, B.; JAYARAMAN, R.; HAWBOLT, E. B.; BRIMACOMBE, J. K. An Assessment of the Additivity Principle in Predicting Continuous-Cooling Austenite-to-Pearlite Transformation Kinetics Using Isothermal Transformation Data. **Met. Trans. A**, v. 17A, p.1493-1503, September/1986.
- 140) UMEMOTO, M.; HORIUCHI, K.; TAMURA, I. Transformation Kinetics during Isothermal Holding and Continuous Cooling. **Trans. ISIJ**, v. 23, p.854-861, 1982.
- 141) LEE, J. K. Prediction of γ/α Transformation during Continuous Cooling of Steel. In: 41st MWSP CONF. PROC., ISS, vol. XXXVII, 1999, p.975-981.
- 142) LUSK, M.; JOU, H-J. On the Rule of Additivity in Phase Transformation Kinetics. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 28A, p. 287-291, February/1997.
- 143) CHRISTIAN, J. W. **The Theory of Transformations in Metals and Alloys**. Oxford, Pergamon Press, 1965, p.21, 471-495.
- 144) YE, J. S.; CHANG, H. B.; HSU, T. Y. On the Application of the Additivity Rule in Pearlitic Transformation in Low Alloy Steels. **Metal. and Mat. Trans. A**, v. 34A, p. 1959-1264, June/2003.
- 145) LEE, C-W.; UHM, S-H.; KIM, K-M.; LEE, K-J.; LEE, C-L. S. Modeling of Phase Transformation Kinetics in the Coarsened Grain HAZ of C-Mn Steel Weld Considering Prior Austenite Grain Size. **ISIJ Int.**, v. 41, n. 11, p.1383-1388, 2001.
- 146) HAN, H. N.; PARK, S-H. Model for Cooling and Phase Transformation Behaviour of Transformation Induced Plasticity Steel on Runout Table in Hot Strip Mill. **Mat. Science and Technol.**, v. 17, p.721-726, June/2001.
- 147) DENIS, S.; FARIAS, D.; SIMON, A. Mathematical Model Coupling Phase Transformations and Temperature Evolutions in Steels. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.316-325, 1992.
- 148) PHADKE, S.; PAUSKAR, P.; SHIVPURI, R. Computational Modeling of Phase Transformations and Mechanical Properties during the Cooling of Hot Rolled Rod. **Journal of Mat. Proc. Technology**, v. 150, p.107-115, 2004.

- 149) BUZA, G.; HOUGARDY, H. P.; GERGELY, M. Calculation of the Isothermal Transformation into two Different Microstructures from Measurements with Continuous Cooling. **Steel Research**, v. 61, n. 10, p.478-481, 1990.
- 150) KRIELAART, G. P.; Van der ZWAAG, S. Kinetics of $\gamma \rightarrow \alpha$ Phase Transformation in Fe-Mn Alloys Containing Low Manganese. **Mat. Science and Technol.**, v. 14, p.10-18, January/1998.
- 151) KOP, T. A.; SIETSMA, J.; Van Der ZWAAG, S. Modelling the Austenite to Ferrite Phase Transformation in Low Carbon Steels in Terms of the Interface Mobility. **ISIJ Int.**, v. 40, n. 7, p.713-718, 2000.
- 152) HANLON, D.; SIETSMA, J.; Van Der ZWAAG, S. An Investigation of the Kinetics of the Austenite to Ferrite Transformation from Deformed Austenite. In: MODELLING OF METAL ROLLING PROCESS, 3rd Conf. Papers, London, December/1999, p.431-441.
- 153) HANLON, D.; SIETSMA, J.; Van Der ZWAAG, S. The Effect of Plastic Deformation of Austenite on the Kinetics of Subsequent Ferrite Formation. **ISIJ Int.**, v. 41, n. 9, p.1028-1036, 2001.
- 154) ÄGREN, J. A Revised Expression for the Diffusivity of Carbon in Binary Fe-C Austenite. **Scripta Metall.**, v. 20, n. 11, p.1507-1510, 1986.
- 155) KIRKALDY, J. S. Diffusion-controlled Phase Transformations in Steels. **Scan. J. Met.**, n. 20, p.50-61, 1991.
- 156) KIRKALDY, J. S.; SHARMA, R. C. A New Phenomenology for Steel IT and CCT Curves. **Acta Mater.**, v. 16, p.1193-1198, 1982.
- 157) LEE, J-L.; CHEN, J. K.; PAN, Y. T.; HSIEH, K. C. Evaluation of Transformation Latent Heat in C-Mn Steels. **ISIJ Int.**, v. 39, n. 3, p.281-287, 1999.
- 158) SAUNDERS, N.; GUO, Z.; LI, X.; MIODOWNIK, A.P.; CHILLÉ, J.P. The Calculation of TTT Diagrams for General Steels. In: 2nd INT. CONF. ON MODELLING OF METAL ROLLING PROCESSES, The Institute of Materials, London, 1996.

- 159) KUZIAK, R.; PIETRZYK, M. Physical and Mathematical Simulation of Phase Transformation during Accelerated Cooling of Eutectoid Steel Rods. In: 42nd MWSP CONF. ISS, v. 38, 2000, p.101-110.
- 160) KAMAMOTO, S.; NISHIMORI, R.; KINOSHITA, S. Analysis of Residual Stress and Distortion Resulting from Quenching in Large Low-alloy Shafts. **Mat. Science and Technol.**, v. 1, p.798-804, October/1985.
- 161) CHOO, S. D.; CHOO, W. Y. An Integrated Model for Microstructural Evolution and its Application to the Properties Prediction of Plate Steels. In: 42nd MWSP CONF. ISS, v. 38, 2000, p.407-417.
- 162) FAZELI, F.; MILITZER, M. Analysis of Ferrite Allotriomorph in Terms of Solute Drag. In: INT. SYMP. ON TRANSFORMATION AND DEFORMATION MECHANISMS IN ADVANCED HIGH-STRENGTH STEELS, 2003, Vancouver/Canada.
- 163) PEISKER, D.; DOKTOROWSKI, A.; DITTRICH, D. Contribution on the Influence of Transformation Structures under Consideration of Austenite Deformation. **Steel Research**, v. 72, n. 3, p.111-114, 2001.
- 164) ANELLI, E.; CESILE, M. C.; NUNZIO, P. E. Prediction of Austenite Decomposition during Cooling of Low and Medium Carbon Low-Alloy Steels. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY 2003 - Modeling, Control and Optimization, Conf. Proc, ISS/TMS, Chicago, 2003, p.453-466.
- 165) UMEMOTO, M.; GUO, Z. H.; TAMURA, I. Effect of Cooling Rate on Grain Size of Ferrite in a Carbon Steel. **Mat. Science and Technol.**, v. 3, p.249-255, April/1987.
- 166) ANDOFER, J.; AUZINGER, D.; HRIBERNIG, G.; HUEBNER, G.; SAMOLIOV, A.; TITOVETS, Y.; VASILIEV, A.; ZOLOTOREVSKII, N. Modelling of Austenite Decomposition of Hot-rolled Plain Carbon Steels under Complex Cooling Conditions. **Steel Research**, v. 71, n. 4, p.118-123, 2000.
- 167) ROBERTS, W.; SANDBERG, A.; SIWECKI, T.; WELEFORS, T. Prediction of Microstructure Development during Recrystallization Hot Rolling of Ti-V Steels. In: APPLICATIONS OF HSLA STEELS, ASM, Philadelphia, 1983, p. 67-84.

- 168) SELLARS, C. M.; BEYNON, J. H. In: PROC. CONF. ON HSLA STEELS, ed. D. P. Dunne and T. Chandra, South Coast Printers, 1985, p.142.
- 169) ANELLI, E. Application of Mathematical Modelling to Hot Rolling and Controlled Cooling of Wire Rods and Bars. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 3, p.440-449, 1992.
- 170) HODGSON, P. D.; GIBBS, R. K. A Mathematical Model to Predict the Mechanical Properties of Hot Rolled C-Mn and Microalloyed Steels. **ISIJ Int.**, v. 32, n. 12, p.1239-1238, 1992.
- 171) CHOQUET, P.; FABRÈQUE, P.; GIUSTI, J.; CHAMONT, B.; PEZANT, J. N.; BLANCHET, F. Modelling of Forces, Structure and Final Properties During the Hot Rolling Process on the Hot Strip Mill. In: MATHEMATICAL MODELLING OF HOT STRIP ROLLING OF STEEL, CIM, Hamilton/Canada, 1990, p.34-43.
- 172) PHANIRAJ, M.; SHAMASUNDAR, S.; LAHIRI, A. K. Bench Marking and Validation of Models Used for Hot Strip Mill. 42nd MWSP CONF. PROC., ISS, v. XXXVIII, 2000, p.825-835.
- 173) YE, J. S.; CHANG, H. B.; HSU, T. Y. A Kinetics Model of Isothermal Ferrite and Pearlite Transformations under Applied Stress. **ISIJ Int.**, v.44, n. 6, p.1079-1085, 2004.
- 174) VENKATRAMAN, M.; MOHANTY, O. N.; GHOSH, R. N. Modelling of Transformation Kinetics in HSLA 100 Steel during Continuous Cooling Rolling. **Scand. Journal of Metall.**, v. 30, p.8 - 13, 2001.
- 175) QU, J. B.; SHAN, Y. Y.; ZHAO, M. Z. YANG, K. Effects of Hot Deformation and Accelerated Cooling on Microstructural Evolution of Low Carbon Microalloyed Steels. **Mat. Science and Technol.**, v. 18, p.145-150, February/2002.
- 176) LEYSEN, F.; PENNING, J.; HOUBAERT, Y. Dilatometric Behaviour of Nb-added CSiMn TRIP Steels. In: THERMEC2003, Madrid/Spain, p.1100-1106.
- 177) HARVIG, H. The Iron-Carbon System in the Temperature Range 500-1150°C. **Jernkont. Ann.**, p. 155-161, 1951.
- 178) CARNAHAN, B.; LUTHER, H. A.; WILKES, J. O. **Applied Numerical Methods**. John Wiley & Sons, 1969.

- 179) BORATTO, F.; BARBOSA, R.; YUE, S.; JONAS, J. J. THERMEC'88, ed. by I. Tamura, Tokyo, Japan, p. 383-390, 1988.
- 180) TEIXEIRA, I. O.; CETLIN, P. R.; RIBEIRO, C. F. Influência das Condições de Resfriamento da Tira após Laminação a Quente nas Propriedades Mecânicas de Aços IF de Alta Resistência. In: 40º SEMINÁRIO DE LAMINAÇÃO ABM, v. 40, 2003, Vitória/ES, p.402-409.
- 181) REES, G. I.; PERDRIX, J.; MAURICKX, T; BHADSHIA, H. K. D. H. The Effect of Niobium in Solid Solution on the Transformation Kinetics of Bainite. **Mat. Science and Eng. A.**, v. 194, p.179-186, 1995.
- 182) IRVINE, K. J.; PICKERING, F. B.; GLADMAN, T. J. **Iron Steel Inst.**, v. 205, p. 161, 1967.
- 183) YUAN, X. Q.; LIU, Z. Y.; JIAO, S. H.; MA, L. Q.; WANG, G. D. The Onset Temperatures of γ to α -Phase Transformation in Hot Deformed and Non-deformed Nb Micro-alloyed Steels. **ISIJ Int.**, v.46, n. 4, p.579-585, 2006.
- 184) De BLAS, J. C. G. Influência da Composição Química e da Velocidade de Resfriamento após Laminação sobre a Temperatura de Início de Transformação Austenita-Ferrita em Aços de Baixo Carbono Microligados ao Níobio. In: 44º CONGRESSO ANUAL DA ABM, v. 44, 1989.
- 185) SANTOS, A. A.; MARRA, K. M. Método de Determinação da Cinética de Transformação de Fases a Partir de Curvas Dilatométricas. In: 61º CONGRESSO ANUAL DA ABM, v. 61, 2006, Rio de Janeiro/RJ.
- 186) SANTOS, A. A.; BARBOSA, R. Modeling Austenite-to-Ferrite Transformation Kinetics in Low-Carbon Manganese Steels during Continuous Cooling. **Mat. Science Forum**, v. 539-543, p.4590-4595, 2007.
- 187) SINGH, S. B.; KRISHNAN, K.; SAHAY, S. S. Modeling of non-isothermal austenite to ferrite transformation in low-carbon steels. **Mat. Science and Eng. A.**, v. 445-446, p.310-315, 2007.
- 188) COSTA NETO, P. L. O. **Estatística**. Edgard Blücher, São Paulo, 1977.

-
- 189) KRAUSS, G. **Steels: Heat Treatment and Processing Principles**. ASM Int., Colorado, 1979, p 146-147, 214.
- 190) MINAMI, K.; SICILIANO Jr., F.; MACCAGNO, T. M.; JONAS, J. J. Mathematical Modeling of Mean Flow Stress during the Hot Strip Rolling of Nb Steels. **ISIJ Int.**, v.36, n. 124, p.1507-1515, 1996.
- 191) SANTOS, A. A.; MELO, T. M. F.; ALÉ, R. M. Mathematical Modelling of Austenite Conditioning during Hot Strip Rolling at Usiminas. In: MATERIALS SCIENCE AND TECHNOLOGY CONF., ISS/TMS, 2003, Chicago, Proceedings...p. 221-230.

17. ANEXO

17.1. Rotina de Cálculos Termodinâmicos de Acordo com Kirkaldy

```

C
*****
C          ===== PROGRAMA TRANS_KM.FOR =====
C  Cálculo das linhas de equilíbrio Ae3, solvus, Acm e Ael para aços
C  com
C  adições de C,Mn,Si,Ni,Cr,Mo,Cu,baseando-se em Kirkaldy.
C  Cálculo da fração transformada de austenita, em ferrita e
C  perlita, a
C  partir de curvas dilatométricas (T,Delat L), de acordo com a
C  formulação
C  de Kop_Medina.
C  Cálculo de Ar1, baseando-se no enriquecimento da austenita em
C  carbono
C  e cálculo das frações de ferrita em equilíbrio ao longo da
C  transforma-
C  ção. Os teores dos elementos precisam ser fornecidos na sequência
C  dada
C  acima, como porcentagem em massa. Da mesma forma, ofs teores
C  chutados
C  para solução da concentração na ferrita. Somente os elementos em
C  quan-
C  tidades significativas devem ser entrados.
C  Pode ser usado qualquer número de elementos no aço, mas é
C  necessário
C  citar o número e os seus índices, que são na ordem 1,2,...7,
C  respecti-
C  vamente para o C,Mn,Si,Ni,Cr,Mo e Cu
C
C  Dimensionamento de arranjos e leitura de dados
C
*****
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      REAL*8 L0
      COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIF(7),EIK(15),YI(15)
      COMMON /COEF2/A(7),B(7),C(7),D(7),PM(8),P(7),Q(7),EIIA(7),
*      CGAMA(15),CALFA(15),XGAMA(15),XALFA(15),XG(15),IEL(10)
      COMMON /KIRK/EQUIL(200,5),XALFI(8),NEQ
      COMMON /CONV/EPS1,EPS2,H,ITMAX,N,IMP
      COMMON /DILATB/DILAT(700,2),XA(700,10)
      COMMON /DILPC/AR3,DILAR3,ARF,DILARF,XINCG,XINCA
      COMMON /CONSTX/XKP,V0,L0,XFI,HF
      DIMENSION XGAMI(8),CGINI(8),CC(700)
C
C  Dados de variação de energia livre e dos coeficientes de
C  atividade
      DATA A/ -64111.4, -111512.6, -24953.4, -19016.3, -1535.5, 2364.0, -
106692
*      .0/

```

```

DATA B/32.158,178.61,162.335,13.527,-19.481,0.63,172.310/
DATA C/0.,-0.0733,0.,0.,0.,0.,-0.071/
DATA D/0.,0.,-19.7669,0.,2.7481,0.,0./
DATA PM/12.,54.94,28.08,58.7,51.996,95.9,63.54,55.84/
DATA EIIIF/0.0,-0.9,26.1,-1.7,-2.7,-3.9,-8.1/
DATA EIIA/8.1,0.2,23.3,-1.7,0.3,-2.1,-6.6/
DATA P/0.,0.,4.84,-2.2,24.4,3.855,0./
DATA Q/1.E-40,-5070,7370,7600,-38400,-17870,4200/
DATA RCONS,ALFAG/8.314,2.25E-05/
C   Leitura de dados
OPEN(11, FILE='EntTrans_KM.TXT',STATUS='OLD')
READ(11,*) N,(IEL(I),I=1,N)
READ(11,*) (CGAMA(I),I=1,N)
READ(11,*) (CALFA(I),I=1,N)
C
C   Condições de resolução do sistema não linear e da equação não
C   linear em fi (cálculo de linhas de equilíbrio)
READ(11,*) IMP,ITMAX,EPS1,EPS2,H
C   Limites para cálculo do diagrama de fases (C0 e Cmax) Obs: por
C   motivo de convergência, Cmax precisa ser limitado a 1%.
READ(11,*) C0,CMAX,WGEMAX
C
C   Leitura de dados das curvas dilatométricas
READ(11,*) NENSAI
READ(11,*) NPON
DO 10 I=1,NPON
10 READ(11,*) DILAT(I,1),DILAT(I,2)
   AR3=DILAT(1,1)
   DILAR3=DILAT(1,2)
   ARF=DILAT(NPON,1)
   DILARF=DILAT(NPON,2)
C
C   Leitura dos pontos de início e final de transformação na curva
C   dilatométrica e de Ar1 por Miettinen, por curva dilatométrica e
C   da fração de ferrita medida
READ(11,*) T0,DILT0
READ(11,*) AR1MIT,AR1CD,XFM
C   Leitura de HF, incremento, e XFI, valor inicial, para solução da
C   fração de ferrita, por Newton-Raphson
READ(11,*) HF,XFI
C
C   Leitura das inclinações das curvas dilatométricas em gama
(xing) e
C   em alfa (xincia), e do coeficiente de dilatação da austenita
(alfag)
READ(11,*) XINGC,XINCA
C
C   Impressão dos dados de entrada
OPEN(12,FILE='ResTrans_KM.DAT',STATUS='UNKNOWN')
WRITE(12,1) NENSAI
WRITE(12,2) ITMAX,N,EPS1,EPS2,H
WRITE(12,3) (CGAMA(I),I=1,N)
WRITE(12,4)
WRITE(12,3) (CALFA(I),I=1,N)
WRITE(12,5) T0,AR1MIT,AR1CD,XFM
WRITE(12,6) XINGC,XINCA,ALFAG
1 FORMAT(/,10X,'SAÍDA DE DADOS DO PROGRAMA
TRANS_KM.FOR',/,4X,'ENSA
*IO: ',I3)

```

```

2 FORMAT(4X,'ITMAX = ',I3,4X,'N = ',I2,4X,'EPS1 = ',E10.4,4X,'EPS2
=
* ',E10.4,4X,'H = ',F6.2,/,10X,'CINICIAL(I),I=1,N')
3 FORMAT(5(4X,F10.4))
4 FORMAT(/,'CHUTE INICIAL DE CONCENTRAÇÃO NA FERRITA (% EM
MASSA)')
5
FORMAT(1X,'T0=',F6.1,2X,'AR1MIT=',F6.1,2X,'AR1CD=',F6.1,2X,'XFM='
*,F6.4,/)
6 FORMAT(4X,'XINCG=',E10.4,4X,'XINCA=',E10.4,4X,'ALFAG=',E10.4)
C
C Ajuste dos dados em DATA para o caso de N < 7
NM1=N+1
IF(N.EQ.7) GO TO 30
IF(N.EQ.2) THEN
PM(NM1)=PM(8)
ELSE IF(N.EQ.3.AND.IEL(3).EQ.3) THEN
PM(NM1)=PM(8)
ELSE
DO 20 J=3,N
NEL=IEL(J)
A(J)=A(NEL)
B(J)=B(NEL)
C(J)=C(NEL)
D(J)=D(NEL)
P(J)=P(NEL)
Q(J)=Q(NEL)
20 PM(J)=PM(NEL)
PM(NM1)=PM(8)
END IF
30 CONTINUE
C
C Transformação das concentrações em massa para fração molar e
arma-
C zenamento de valores iniciais
ISEN=1
IFASE=1
CALL MOLAR(ISEN,IFASE,N)
DO 40 J=1,NM1
XGAMI(J)=XGAMA(J)
XALFI(J)=XALFA(J)
40 CGINI(J)=CGAMA(J)
C
C Cálculo da temperatura Ae3
C WRITE(*,*) 'ENTRE COM TEMPERATURA INICIAL PARA CÁLCULAR TAE3,
(°C)'
C READ(*,*) TRI
TRI=750
TR=TRI
CALL CALTAE3(TR,RCONS,TAE3)
C
C Impressão AE3 e concentração de equilíbrio na ferrita (% massa)
WRITE(12,42) TAE3
42 FORMAT(/,4X,'AE3 = ',F6.1,'°C')
C
C Cálculo das concentrações de C na ferrita, na linha ferrita/aus-
C tenita e na linha austenita/cementita em função da temperatura
CALL PHBOUN(CGINI,TRI,C0,CMAX,WGEMAX,NEQUI)
C

```

```

C      Cálculo de Ae1 (intercessão entre Ae3 e Acm)
      DO 50 J=1,NEQ-1
      DIF1=EQUIL(J,5)-EQUIL(J,2)
      DIF2=EQUIL(J+1,5)-EQUIL(J+1,2)
      IF(DIF1.GE.0.AND.DIF2.LT.0) THEN
      XMG=(EQUIL(J+1,2)-EQUIL(J,2))/(EQUIL(J+1,1)-EQUIL(J,1))
      XMC=(EQUIL(J+1,5)-EQUIL(J,5))/(EQUIL(J+1,1)-EQUIL(J,1))
      CEUT=(XMC*EQUIL(J,5)-XMG*EQUIL(J,2))/(XMC-XMG)
      AE1=EQUIL(J,1)+XMC*(CEUT-EQUIL(J,5))
      GO TO 60
      END IF
50 CONTINUE
60 CONTINUE

C
C      Cálculo de cgama, XA(J,5), calfa, XA(J,6) e c_a_eq, XA(J,2) e
C      Ccem, CC(J), nos pontos da curva dilatométrica.
      DO 68 J=1,NPON
      T=DILAT(J,1)
      DO 66 I=1,NEQUI-1
      DIF1=EQUIL(I,1)-T
      DIF2=EQUIL(I+1,1)-T
      IF(DIF1.LT.0.OR.DIF2.GE.0.) GO TO 66
      FATOR=(T-EQUIL(I,1))/(EQUIL(I+1,1)-EQUIL(I,1))
      CAINT=EQUIL(I,3)+(EQUIL(I+1,3)-EQUIL(I,3))*FATOR
      CCEM=EQUIL(I,5)+(EQUIL(I+1,5)-EQUIL(I,5))*FATOR
      IF(T.GE.AE1) THEN
      CGINT=EQUIL(I,2)+(EQUIL(I+1,2)-EQUIL(I,2))*FATOR
      ELSE
      CGINT=CEUT
      END IF
      XA(J,5)=CAINT
      XA(J,6)=CGINT
      CC(J)=CCEM

C      Fração de ferrita em equilíbrio
      IF(T.GE.AE1) THEN
      XLIM=CGINT
      ELSE
      XLIM=CCEM
      END IF
      XA(J,2)=(XLIM-CGINI(1))/(XLIM-CAINT)
66 CONTINUE
68 CONTINUE

C
C      CÁLCULO DA FRAÇÃO TRANSFORMADA PELA REGRA DA ALAVANCA
      CALL RALAV(CGINI,CC,AR1RL,XAR1RL,NPON)

C
C      CÁLCULO DA FRAÇÃO TRANSFORMADA PELO MÉTODO DE KOP_MEDINA

C      Cálculos preliminares
      L0=DABS(XINCG)/ALFAG
      XKSI=XGAMI(1)
      TK=T0+273

C      Calcula volume molar da austenita em T0
      CALL VGAMA(TK,XKSI,VG)
      V0=VG

C      Determinação de k gama
      TK=AR3+273
      CALL VGAMA(TK,XKSI,VG)
      XKG=VG/(V0*(3*DILAR3/L0+1))

```

```

C      Início do loop para convergir a fração transformada total para 1
C      ajustando-se a fração transformada em Ar1, de acordo com o
cálculo
C      do enriquecimento da austenita
      XFMA=XFM
      CAAR1=0
      ICONT=0
      TOLXA=0.02
70 CONTINUE
      ICONT=ICONT+1
C      Cálculo de k alfa, baseando-se na fração transformada em Ar1
C      CGAR1=CGINI(1)/(1-XFM)
      CGAR1=(CGINI(1)-XFMA*CAAR1)/(1-XFMA)
      RO=CGAR1/(6.67-CAAR1)
      TK=ARF+273
      CALL VALFA(TK,VA)
      CALL VPER(TK,RO,VA,VP)
      XKA=(VA*XFMA+VP*(1-XFMA))/(V0*(1+3*DILARF/L0))
C
      WRITE(12,72) XKG,XKA
72 FORMAT(/,5X,'XKG = ', F7.4,4X,'XKA = ', F7.4)
C
C      Cálculo das frações transformadas considerando-se a temperatura
C      Ar1 medida (AR1CD), como limite para formação da ferrita
      DO 74 J=2,NPON
      T=DILAT(J,1)
      XKP=XKG+(XKA-XKG)*(T-AR3)/(ARF-AR3)
C      Transformação para ferrita
      IF(T.GE.AR1CD) THEN
C      Retorna com valores de XF e ksi
      CALL FALFA(CGINI,T,XFE,XKSI,N,J)
      XA(J,7)=XFE
      XAFCD=XFE
      XKSIC=XKSI
      CGAR1C=CGAMA(1)
      CAAR1C=XA(J,5)
      ELSE
C      Transformação para perlita
C      Vai ser usada, primeiro, a fração calculada da ferrita
transformada
      RO=(CGAR1C-CAAR1C)/(6.67-CAAR1C)
      CALL FPER(XKSIC,XAFCD,T,RO,XPER,J)
      XA(J,7)=XPER
      END IF
74 CONTINUE
C
C      Cálculo das frações transformadas considerando-se a temperatura
C      Ar1 de Miettinen (AR1MIT), como limite para formação da ferrita
      DO 76 J=2,NPON
      T=DILAT(J,1)
      XKP=XKG+(XKA-XKG)*(T-AR3)/(ARF-AR3)
C      Transformação para ferrita
      IF(T.GE.AR1MIT) THEN
C      Retorna com valores de XF e ksi
      CALL FALFA(CGINI,T,XFE,XKSI,N,J)
      XA(J,8)=XFE
      XAFMT=XFE
      XKSIM=XKSI
      CGAR1M=CGAMA(1)

```

```

        CAAR1M=XA(J,5)
        ELSE
C      Transformação para perlita
C      Vai ser usada, primeiro, a fração calculada da ferrita
transformada
        RO=(CGAR1M-CAAR1M)/(6.67-CAAR1M)
        CALL FPER(XKSIM,XAFMT,T,RO,XPER,J)
        XA(J,8)=XPER
        END IF
    76 CONTINUE
C
C      Cálculo da fração transformada, considerando-se o AR1 calculado
C      pelo enriquecimento da austenita
C
        AR1=0
C      Introduzido um marcador (LPER) para atender ao caso de XA_KM
calcu-
C      lado para curvas que mostram recaslescência (aços alto Carbono),
pois
C      se T fosse maior que Ar1, mas na faixa de formação de perlita, o
cál
C      culo estava sendo feito como ferrita, gerando erro em XA_KM.
        LPER=0
        DO 82 J=2,NPON
        IF(XA(J,1).GE.1) GO TO 82
        T=DILAT(J,1)
        XKP=XKG+(XKA-XKG)*(T-AR3)/(ARF-AR3)
        CAINT=XA(J,5)
        CGINT=XA(J,6)
        CCEM=CC(J)
C      Transformação para ferrita
        IF(T.GT.AR1.AND.LPER.EQ.0) THEN
C      Retorna com valores de XF e ksi
        CALL FALFA(CGINI,T,XFE,XKSI,N,J)
        XA(J,1)=XFE
C      Valores de ksi para interpolação em AR1, e depois para a perlita
        XKSIV=XKSIN
        XKSIN=XKSI
        XA(J,3)=CGAMA(1)
C
C      Verificação se atingiu Ar1
C
C      Ar1 acima de Ael (parece contra-senso, mas é apenas um teste)
        IF(AR1.NE.0.OR.CGINT.GT.XA(J,3)) GO TO 78
        XMG=(XA(J,6)-XA(J-1,6))/(T-DILAT(J-1,2))
        XMEN=(XA(J,3)-XA(J-1,3))/(T-DILAT(J-1,1))
C      CAR1: concentração de C na linha de equilíbrio austenita ou
cemen-
C      tita, em AR1; CAAR1: concentração de C na ferrita neste ponto
        CAR1=(XMEN*XA(J-1,3)-XMG*XA(J-1,6))/(XMEN-XMG)
        AR1=DILAT(J-1,1)+XMEN*(CAR1-XA(J-1,3))
C      Fração transformada em AR1
        XAAR1=XA(J-1,1)+(XA(J,8)-XA(J-1,1))*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-
DILAT(J-
        *1,1))
        CAAR1=XA(J-1,5)+(XA(J,5)-XA(J-1,5))*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-
DILAT(J-
        *1,1))
        XKSIC=XKSIV+(XKSIV-XKSIN)*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-DILAT(J-1,1))

```

```

      RO=(CAR1-CAAR1)/(6.67-CAAR1)
      GO TO 80
C     Ar1 abaixo de Ae1
      78 CONTINUE
      IF(AR1.NE.0.OR.CCEM.GT.XA(J,3)) GO TO 80
      XMC=(CC(J)-CC(J-1))/(T-DILAT(J-1,1))
      XMEN=(XA(J,3)-XA(J-1,3))/(T-DILAT(J-1,1))
      CAR1=(XMEN*XA(J-1,3)-XMC*CC(J-1))/(XMEN-XMC)
      AR1=DILAT(J-1,1)+XMEN*(CAR1-XA(J-1,3))
C     Fração transformada em AR1
      XAAR1=XA(J-1,1)+(XA(J,1)-XA(J-1,1))*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-
DILAT(J-
      *1,1))
      CAAR1=XA(J-1,5)+(XA(J,5)-XA(J-1,5))*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-
DILAT(J-
      *1,1))
      XKSIC=XKSIV+(XKSIV-XKSIN)*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-DILAT(J-1,1))
      RO=(CAR1-CAAR1)/(6.67-CAAR1)
      JAR1=J
      80 CONTINUE
C
C     Transformação para perlita abaixo de Ar1
      ELSE
      LPER=1
      CALL FPER(XKSIC,XFM,T,RO,XPER,J)
      XA(J,1)=XPER
      END IF
      82 CONTINUE
C
C     Teste de convergência da fração transformada total
      XAT=XAAR1+XA(NPON,1)
      IF(DABS(XAT-1).LT.TOLXA) GO TO 84
      XFMA=XAAR1
      IF(ICONT.GE.3) TOLXA=0.50
      IF(ICONT.GE.5) TOLXA=1.0
      IF(ICONT.GE.10) THEN
      WRITE(12,140) XAT
      140 FORMAT(//,2X,'SUPERADO 10 LOOPS E NÃO ATINGIU TOL < 0,05',
'XAT=' ,
      *F6.4)
      STOP
      END IF
      GO TO 70
      84 CONTINUE
C
C     Cálculo da fração de perlita admitida em equilíbrio, abaixo de
Ar1
      IF(AR1.GE.AE1) GO TO 96
      DO 94 J=JAR1,NPON
      IF(XA(J,2).LT.0.) XA(J,2)=0
      94 XA(J,4)=1-XA(J,2)
      96 CONTINUE
C
C     Impressão de resultados
      WRITE(12,100) AE1,CEUT
      100 FORMAT(/,5X,'AE1 = ',F6.1,3X,'C EUTETOIDE=',F7.5)
      WRITE(12,105) AR1,XAAR1
      WRITE(12,107) AR1RL,XAR1RL
      WRITE(12,115) XAFCD,XAFMT

```

```

105 FORMAT(/,5X,'AR1 = ',F6.1,3X,'XAAR1 = ',F6.4)
107 FORMAT(//,5X,'AR1RL = ',F6.1,3X,'XAR1RL = ',F6.4)
115 FORMAT(/,1X,'X AFC = ',F6.4,2X,'X AFMI = ',F6.4)
    WRITE(12,120)
    DO 110 J=1,NPON
110 WRITE(12,130) DILAT(J,1),(XA(J,I),I=1,10)
120 FORMAT(/,2X,'T',4X,'XA_KM',4X,'XEF',3X,'CA-
ENR',2X,'XEP',3X,'CALFA
    *',2X,'CGAMA',3X,'XACD',2X,'XAMIT',2X,'XA_RL',2X,'CEN-RL')
130 FORMAT(1X,F5.1,1X,10(F6.4,1X))
C
    END
C
C
C    Início das subrotinas
C
C    SUBROTINA MOLAR
C
C    Transformação entre concentrações em massa e fração molar.
C    ISEN=1 (massa>molar); ISEN/=1 (molar>massa)
C    IFASE=1 (ferrita+austenita); IFASE=2 (ferrita); IFASE=3
(austenita)
C
    SUBROUTINE MOLAR(ISEN,IFASE,N)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    COMMON /COEF2/A(7),B(7),C(7),D(7),PM(8),P(7),Q(7),EIIA(7),
*        CGAMA(15),CALFA(15),XGAMA(15),XALFA(15),XG(15),IEL(10)
C
    NM1=N+1
    IF(ISEN.EQ.1) THEN
    IF(IFASE.NE.1.AND.IFASE.NE.2) GO TO 40
C
C    Cálculo das frações molares na ferrita
    SOMAM=0
    DO 10 I=1,N
10  SOMAM=SOMAM+CALFA(I)
    CALFA(NM1)=100-SOMAM
    XSOMA = 0
    DO 20 I = 1,NM1
    XG(I)=CALFA(I)/PM(I)
20  XSOMA=XSOMA+XG(I)
    SOMAX=0
    DO 30 I = 1,N
    XALFA(I)=XG(I)/XSOMA
30  SOMAX=SOMAX+XALFA(I)
    XALFA(NM1)=1-SOMAX
    IF(IFASE.EQ.2) GO TO 130
C
C    Cálculo das frações molares na austenita
40  SOMAM=0
    DO 50 I=1,N
50  SOMAM=SOMAM+CGAMA(I)
    CGAMA(NM1)=100-SOMAM
    XSOMA = 0
    DO 60 I = 1,NM1
    XG(I)=CGAMA(I)/PM(I)
60  XSOMA=XSOMA+XG(I)
    SOMAX=0
    DO 70 I = 1,N

```

```

      XGAMA(I)=XG(I)/XSOMA
70  SOMAX=SOMAX+XGAMA(I)
      XGAMA(NM1)=1-SOMAX
C
C  Conversão de fração molar para concentração em massa. (XG(I) é a
C  massa de cada espécie, considerando-se que o número total de
C  moles na mistura é 1)
      ELSE
      IF(IFASE.NE.1.AND.IFASE.NE.2) GO TO 100
C
C  Concentração em massa na ferrita
      SOMX=0
      DO 80 I=1,NM1
      XG(I)=PM(I)*XALFA(I)
80  SOMX=SOMX+XG(I)
      DO 90 I=1,NM1
90  CALFA(I)=XG(I)/SOMX*100
      IF(IFASE.EQ.2) GO TO 130
C
C  Concentração em massa na austenita
100 SOMX=0
      DO 110 I=1,NM1
      XG(I)=PM(I)*XGAMA(I)
110 SOMX=SOMX+XG(I)
      DO 120 I=1,NM1
120 CGAMA(I)=XG(I)/SOMX*100
C
      END IF
130 CONTINUE
      RETURN
      END
C
C  SUBROTINA VGAMA
C  Volume molar da austenita, em função da temperatura e da fração
C  atômica de carbono
C
      SUBROUTINE VGAMA(TK,XKSI,VG)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      AG=(3.6306+0.78*XKSI)*(1+(24.9-50*XKSI)*(TK-1000)*1.E-06)
      VG=0.25*AG*AG*AG
      RETURN
      END
C
C  SUBROTINA VALFA
C  Volume molar da ferrita, em função da temperatura
C
      SUBROUTINE VALFA(TK,VA)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      AA=2.8863*(1+17.5E-06*(TK-800))
      VA=0.5*AA*AA*AA
      RETURN
      END
C
C  SUBROTINA VPER
C  Volume molar da perlita em função dos volumes de cementita e
C  ferrita
C
      SUBROUTINE VPER(TK,RO,VA,VP)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)

```

```

TERMC=1+(5.311E-06-1.492E-09*TK+9.655E-12*TK*TK)*(TK-293)
AC=4.5234*TERMC
BC=5.0883*TERMC
CC=6.7426*TERMC
VC=AC*BC*CC/12
VP=(1-RO)*VA+RO*VC
RETURN
END
C
C SUBROTINA FALFA
C Cálculo da fração formada de ferrita, por método iterativo
C
SUBROUTINE FALFA(CGINI,T,XFE,XKSI,N,J)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
REAL*8 L0
COMMON /COEF2/A(7),B(7),C(7),D(7),PM(8),P(7),Q(7),EIIA(7),
* CGAMA(15),CALFA(15),XGAMA(15),XALFA(15),XG(15),IEL(10)
COMMON /DILATB/DILAT(700,2),XA(700,10)
COMMON /CONSTX/XKP,V0,L0,XFI,HF
DIMENSION CGINI(8)
C
V=XKP*V0*(1+3*DILAT(J,2)/L0)
C Início do loop para solução da equação não linear por Newton-
C Raphson,sendo admitido o chute inicial da solução como XFI
ILOOP=0
XFE=XFI
XFER=XFI
C
10 CONTINUE
ILOOP=ILOOP+1
INDER = 1
20 CONTINUE
C
C Cálculo de CGAMA enriquecido
CGAMA(1)=(CGINI(1)-XFE*XA(J,5))/(1-XFE)
C Transforma % em massa em fração atômica
CALL MOLAR(1,3,N)
XKSI=XGAMA(1)
C Calcula volumes molares da austenita e da ferrita
TK=T+273
CALL VGAMA(TK,XKSI,VG)
CALL VALFA(TK,VA)
C Função fi - equação resolvida por NR
FIGE=XFE*(VA-VG)-V+VG
C
C Determinação da derivada numérica de fi e novo valor de XFE
IF(INDER.EQ.2) GO TO 30
FIGE1=FIGE
INDER=2
XFE=XFER+HF
GO TO 20
30 FIGE2=FIGE
FIGEM=(FIGE1+FIGE2)/2
FILIN=(FIGE2-FIGE1)/HF
XFEN=XFER-FIGEM/FILIN
C
IF(ILOOP.GT.50) THEN
WRITE(12,32) J
32 FORMAT('F ALFA NÃO CONVERGIU APÓS 50 LOOPS, J=',I3)

```

```

      GO TO 50
      END IF
C
C      WRITE(12,81) XFEN
C 81 FORMAT(3X,'XFEN = ',F10.4)
C
C      Checagem de convergência
      IF(DABS(XFEN-XFER).LT.0.00005) GO TO 40
      XFE=XFEN
      XFER=XFEN
      GO TO 10
C
C 40 CONTINUE
      XFE=XFEN
C 50 CONTINUE
      RETURN
      END
C
C      SUBROTINA FPER
C      Cálculo da fração formada de perlita após formação da ferrita
C
      SUBROUTINE FPER(XKSI,XAF,T,RO,XPER,J)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      REAL*8 L0
      COMMON /DILATB/DILAT(700,2),XA(700,10)
      COMMON /CONSTX/XKP,V0,L0,XFI,HF
C
      TK=T+273
      V=XKP*V0*(1+3*DILAT(J,2)/L0)
C
C      Cálculo dos volumes molares da ferrita, austenita e cementita
      CALL VGAMA(TK,XKSI,VG)
      CALL VALFA(TK,VA)
      CALL VPER(TK,RO,VA,VP)
C
      XPER=(V-VG+XAF*(VG-VA))/(VP-VG)
      RETURN
      END
C
C      SUBROTINA CALTAE3
C      Determinação da temperatura Ae3 do aço de acordo com Kirkady
C      IEQ é um controlador para imprimir resultados de temperatura
C      Ae3. IEQ=1, > imprime; IEQ=/1, não imprime
C
      SUBROUTINE CALTAE3(TR,RCONS,TAE3)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIIF(7),EIK(15),YI(15)
      COMMON /COEF2/A(7),B(7),C(7),D(7),PM(8),P(7),Q(7),EIIA(7),
*      CGAMA(15),CALFA(15),XGAMA(15),XALFA(15),XG(15),IEL(10)
      COMMON /CONV/EPS1,EPS2,H,ITMAX,N,IMP
C
      NM1=N+1
      IF(IMP.EQ.1) THEN
      OPEN(13,FILE='RESAe3.DAT',STATUS='UNKNOWN')
      WRITE(13,200) ITMAX,N,EPS1,EPS2,H
      WRITE(13,210) (CGAMA(I),I=1,NM1)
      WRITE(13,220) TR
      WRITE(13,230) (XGAMA(I),I=1,NM1)
      END IF

```

```

C
  DO 10 I=1,N
10  XOLD(I)=XALFA(I)
    ILOOP=0
    TR=TR+273
    T=TR
C
  20 CONTINUE
    ILOOP=ILOOP+1
    INDER = 1
  30 CONTINUE
C
C    Cálculo da variação de energia livre, dos coeficientes de
C    atividade e do termo constante do sistema de equações não
C    lineares
C
  DO 40 J=2,N
40  EIK(J)=P(J)+Q(J)/T
    EIIA(1)=8910/T
    EIK(1)=EIIA(1)
C
  DO 60 I=1,N
    DELTAG=A(I)+B(I)*T+C(I)*T*T+D(I)*T*ALOG(T)
    DELGR=DELTAG/RCONS/T
C
C    Último termo do segundo membro (relativo à austenita)
C    IF(I.EQ.1) THEN
      TEP=0
      DO 50 J=1,N
50   TEP=TEP+EIK(J)*XGAMA(J)
      ELSE
        TEP=EIK(I)*XGAMA(1)+EIIA(I)*XGAMA(I)
      END IF
C
C    Cálculo do termo constante
C    YI(I)=DELGR+ALOG(XGAMA(I))+TEP
  60 CONTINUE
C
C    Chama a resolução do sistema de equações não lineares para
C    cálculo
C    das concentrações molares na ferrita, que vêm no vetor XOLD
  CALL NLINRP
C
C    Determinação da nova temperatura que satisfaça ao equilíbrio do
C    potencial químico do Fe nas duas fases (função fi)
  SOMC=0
  DO 70 I=1,N
    XALFA(I)=XOLD(I)
70  SOMC=SOMC+XOLD(I)
    XALFA(NM1)=1-SOMC
C
  DELTAG=25568-57.754*T+0.043308*T*T-1.0783E-05*T**3
  DELGR=DELTAG/RCONS/T
C
C    Somatório do primeiro membro - austenita
  SOMA=0
  DO 90 I=1,N
    IF(I.EQ.1) THEN
      DO 80 J=2,N

```

```

80 SOMA=SOMA+EIK(J)*XGAMA(1)*XGAMA(I)
   SOMA=SOMA+EIIA(1)*XGAMA(1)*XGAMA(1)
   ELSE
   SOMA=SOMA+EIK(I)*XGAMA(I)*XGAMA(1)+EIIA(I)*XGAMA(I)*XGAMA(I)
   END IF
90 CONTINUE
C
C   Somatório do segundo membro - ferrita
   SOMF=0
   DO 110 I=1,N
   IF(I.EQ.1) THEN
   DO 100 J=2,N
100  SOMF=SOMF+EIK(J)*XALFA(1)*XALFA(I)
      SOMF=SOMF+EIIF(1)*XALFA(1)*XALFA(1)
      ELSE
      SOMF=SOMF+EIK(I)*XALFA(I)*XALFA(1)+EIIF(I)*XALFA(I)*XALFA(I)
      END IF
110 CONTINUE
C
C   Função fi
   FITE=DELGR-0.5*SOMA+ALOG(XGAMA(NM1))-ALOG(XALFA(NM1))+0.5*SOMF
C
C   Determinação da derivada numérica de fi
   IF(INDER.EQ.2) GO TO 120
   FITE1=FITE
   INDER=2
   T=T+H
   GO TO 30
120 FITE2=FITE
   FITEM=(FITE1+FITE2)/2
   FILIN=(FITE2-FITE1)/H
   TNOV=TR-FITEM/FILIN
C
C   Checagem de convergência
   IF(DABS(TNOV-TR).LT.0.1) GO TO 130
   T=TNOV
   TR=TNOV
   GO TO 20
C
130 CONTINUE
   TAE3=TNOV-273
C
C   Transformação da fração molar em % em massa - na ferrita
   CALL MOLAR(2,2,N)
C
   IF(IMP.EQ.1) THEN
   WRITE(13,140) TAE3,ILOOP
   WRITE(13,150)
   WRITE(13,160) (XALFA(I),I=1,NM1)
   END IF
140 FORMAT(4X,'TEMPERATURA AE3 = ',F8.2,4X,'NUMERO DE LOOPS = ',I3)
150 FORMAT(/,8X,'FRAÇÕES MOLARES NA FERRITA DO C,Mn,Si,Ni,Cr,Mo,Cu')
160 FORMAT(5(4X,F8.4))
200 FORMAT(4X,'ITMAX = ',I3,4X,'N = ',I2,4X,'EPS1 = ',E10.4,4X,'EPS2
=
   *',E10.4,4X,'H = ',F6.2,/,10X,'CINICIAL(I),I=1,NM1')
210 FORMAT(5(4X,F10.4))
220 FORMAT(5X,'TR = ',F6.1,'°C')
230 FORMAT(4X,'FRAÇÕES MOLARES NA AUSTENITA',/,5(4X,F10.4))

```

```

C
      RETURN
      END
C
C   SUBROTINA NLINRP
C   Solução de sistemas de equações não lineares pelo método de
Newton-
C   Raphson
C       - Rotinas do livro de Carnahan -
C   Este programa resolve um sistema de N equações simulatâneas não
line-
C   ares. Os valores iniciais do vetor incógnita são entrados em
XOLD(1)..
C   ...XOLD(N). O programa chama primeiro a rotina CALCN para
computar os
c   elementos de A, que é a matriz aumentada das derivadas parciais,
depois
c   chama a subrotina SIMUL para resolver o sistema de equações
lineares
c   gerado para os incrementos nos valores da solução
XINC(1)...XINC(N).
c   DETER é o Jacobiano computado por SIMUL. As soluções são
atualizadas
c   e o processo continua até que, ITER, o número de iterações excede
ITMAX
c   ou até que a variação nas N variáveis seja menor que EPS2 (ITCON
= 1,
c   neste caso). EPS1 é a mínima magnitude do PIVOT permitida em
SIMUL.
c   Quando IMP = 1, valores intermediários de solução são impressos
após cada iteração.
C
      SUBROUTINE NLINRP
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIF(7),EIK(15),YI(15)
      COMMON /CONV/EPS1, EPS2, H, ITMAX, N, IMP
      DIMENSION XINC(15)
      NM1=N+1
C
C   Iteração de Newton-Raphson
      DO 30 ITER=1,ITMAX
C   Chama CALCN para estabelecer os coeficientes nxn da matriz AM
      CALL CALCN(N)
C
C   Chama SOVLIN para computar o Jacobiano e correções em XINC
      CALL SOLVLIN(EPS1,N,1,SIMUL,DETER,XINC)
C
      IF(DETER.NE.0) GO TO 10
      WRITE(12,201)
C
C   VERIFICAÇÃO DE CONVERGÊNCIA E ATUALIZAÇÃO DE VALORES
10  ITCON = 1
      DO 20 I=1,N
      IF(ABS(XINC(I)).GT.EPS2) ITCON =0
20  XOLD(I)=XOLD(I)+XINC(I)
      IF(IMP.EQ.1) WRITE(12,202) ITER,DETER,(XOLD(I),I=1,N)
      IF(ITCON.EQ.0) GO TO 30
      IF(IMP.EQ.1) WRITE(13,203) ITER,(XOLD(I),I=1,N)
      GO TO 40

```

```

30 CONTINUE
C
WRITE(12,204)
C
40 CONTINUE
201 FORMAT(5X,'MATRIZ MAL CONDICIONADA OU SINGULAR')
202 FORMAT(5X,'ITER = ',I3,4X,'DETER = ',E14.4,/,5(4X,F10.7))
203 FORMAT(5X,'SOLUÇÃO CONVERGIU',4X,'ITER = ',I3,/,5(4X,F10.7))
204 FORMAT(5X,'NÃO CONVERGÊNCIA')
C
RETURN
END
C
C SUBROTINA CALCN
C
C Esta subrotina define a matriz aumentada AM contendo as
derivadas
C parciais para a solução do sistema não linear para o problema de
C equilíbrio termodinâmico entre os elementos C,Mn,Si,Ni,Cr,Mo e
Cu
C no aço entre as fases ferrita e austenita.
C
SUBROUTINE CALCN(N)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIIF(7),EIK(15),YI(15)
C
C Zera a matriz AM (somente em nxn, pois a coluna n+1 está cheia
NM1=N+1
DO 10 I=1,N
DO 10 J=1,N
10 AM(I,J)=0.
C
C Cálculo dos coeficientes não nulos da matriz AM
AM(1,1)=1/XOLD(1)+EIIIF(1)
DO 20 I=2,N
20 AM(1,I)=EIK(I)
T1=ALOG(XOLD(1))+EIIIF(1)*XOLD(1)
DO 30 I=2,N
30 T1=T1+EIK(I)*XOLD(I)
AM(1,NM1)=YI(1)-T1
DO 40 I=2,N
AM(I,1)=EIK(I)
AM(I,I)=1/XOLD(I)+EIIIF(I)
40 AM(I,NM1)=YI(I)-EIK(I)*XOLD(I)-ALOG(XOLD(I))-EIIIF(I)*XOLD(I)
RETURN
END
C
C
C SUBROTINA SOLVLIN
C
C Quando INDIC é negativo, SIMUL calcula a inversa da matriz A
nxn.
C Quando INDIC é zero, SIMUL calcula a solução X(1)...X(N) corres-
C pondente ao sistema de equações lineares na matriz aumentada A
de
C n por n+1 e, além disso, calcula a inversa da matriz coeficiente
C acima. Quando INDIC é positivo, computa a solução do sistema
linear,
C mas a matriz inversa não é computada.

```

```

C      Utiliza-se o método de Gauss-Jordan de eliminação completa,
C      com a estratégia de pivot máximo. Os subscritos das linhas e
C      colunas
C      dos pivots sucessivos são armazenados nos arranjos IROW e JCOL,
res-
C      pectivamente. K é o contador de pivot, PIVOT é o valor algébrico
do
C      elemento pivot, MAX é o número de colunas de A e DETER é o
determi-
C      nante da matriz coeficiente. As soluções são computadas na
coluna
C      n+1 de A e então colocadas na ordem apropriada no vetor
X(1)...X(N),
C      usando as informações dos subscritos dos pivots em IROW e JCOL.
O
C      sinal do determinante é ajustado, se necessário, determinando-se
se
C      a troca de um número par ou ímpar or par de números é necessária
para
C      colocar os elementos do arranjo JORD em sequência ascendente
onde
C      JORD(IROW(I))=JCOL(I). Se a inversa é requerida ela é trocada
usando
C      Y(1)..Y(N) como armazenamento temporário. O valor do
determinante é
C      retornado como o valor da função. Caso o pivot potencial de
maior
C      magnitude seja menor que EPS, a matriz é considerada singular e
C      um valor nulo é retornado pela função.
C
      SUBROUTINE SOLVLIN(EPS,N,INDIC,SIMUL,DETER,X)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIF(7),EIK(15),YI(15)
      DIMENSION IROW(15),JCOL(15),JORD(15),Y(15),X(N)
C
      MAX=N
      IF(INDIC.GE.0) MAX=N+1
C
C      Se N maior que 15...
      IF(N.LE.15) GO TO 10
      WRITE(12,200)
      SIMUL=0
      RETURN
C
C      Comece o procedimento de eliminação
10 DETER=1
      DO 80 K=1,N
      KM1=K-1
C
C      .... Procura o elemento PIVOT....
      PIVOT =0
      DO 40 I=1,N
      DO 40 J=1,N
C      ... Varrimento de IROW e JCOL para subscritos de PIVOT inválidos
      IF(K.EQ.1) GO TO 30
      DO 20 ISCAN=1,KM1
      DO 20 JSCAN=1,KM1
      IF(I.EQ.IROW(ISCAN)) GO TO 40
      IF(J.EQ.JCOL(JSCAN)) GO TO 40

```

```

20 CONTINUE
30 IF(DABS(AM(I,J)).LE.DABS(PIVOT)) GO TO 40
   PIVOT=AM(I,J)
   IROW(K)=I
   JCOL(K)=J
40 CONTINUE
C
C   ...Assegurando que PIVOT é maior que EPS
   IF(DABS(PIVOT).GT.EPS) GO TO 50
   SIMUL=0
   RETURN
C
C   ...Atualize o valor do determinante
50 IROWK=IROW(K)
   JCOLK=JCOL(K)
   DETER=DETER*PIVOT
C
C   ...Normalização dos elementos PIVOT
   DO 60 J=1,MAX
60 AM(IROWK,J)=AM(IROWK,J)/PIVOT
C
C   ...Fazendo a eliminação e desenvolvendo a inversa
   AM(IROWK,JCOLK)=1/PIVOT
   DO 80 I=1,N
   AIJCK=AM(I,JCOLK)
   IF(I.EQ.IROWK) GO TO 80
   AM(I,JCOLK)=-AIJCK/PIVOT
   DO 70 J=1,MAX
   IF(J.NE.JCOLK) AM(I,J)=AM(I,J)-AIJCK*AM(IROWK,J)
70 CONTINUE
80 CONTINUE
C
C   . Ordenação dos valores solução,se existir, e criação do arranjo
JORD
   DO 90 I=1,N
   IROWI=IROW(I)
   JCOLI=JCOL(I)
   JORD(IROWI)=JCOLI
   IF(INDIC.GE.0) X(JCOLI)=AM(IROWI,MAX)
90 CONTINUE
C
C   ... Ajuste do sinal do determinante
   INTCH=0
   NM1=N-1
   DO 100 I=1,NM1
   IP1=I+1
   DO 100 J=IP1,N
   IF(JORD(J).GE.JORD(I)) GO TO 100
   JTEMP=JORD(J)
   JORD(J)=JORD(I)
   JORD(I)=JTEMP
   INTCH=INTCH+1
100 CONTINUE
   IF(INTCH/2*2.NE.INTCH) DETER = -DETER
C
C   ...Se INDIC é positivo retorne com os resultados
   IF(INDIC.LE.0) GO TO 110
   SIMUL=DETER
   RETURN

```

```

C
C    ...Se INDIC é negativo ou zero ajuste (unscramble) a inversa
c    ...primeiro por linhas
110 DO 130 J=1,N
    DO 120 I=1,N
        IROWI=IROW(I)
        JCOLI=JCOL(I)
120 Y(JCOLI)=AM(IROWI,J)
    DO 130 I=1,N
130 AM(I,J)=Y(I)
C    ... depois por colunas
    DO 150 I=1,N
    DO 140 J=1,N
        IROWJ=IROW(J)
        JCOLJ=JCOL(J)
140 Y(IROWJ)=AM(I,JCOLJ)
    DO 150 J=1,N
150 AM(I,J)=Y(J)
C
C    ..Retorno para INDIC negativo ou zero
    SIMUL=DETER
    RETURN
C
C    ...Formato para declaração de saída
200 FORMAT(5X,'N MUITO GRANDE')
C
    RETURN
    END
C
C    SUBROTINA PHBOUN (phase boundary)
C    Cálculo dos valores de T e concentrações de equilíbrio do C na
C    ferrita
C    e na austenita, e ponto da linha Acm no vetor EQUIL(J,K)
C    (J=1,NEQ, K=1
C    para T, K=2 para Cgama,K=3 para Calfa, K=4 para xgama e K=5,
C    para %C
C    em Acm. NEQ = número de pontos (valores de concentração de
C    carbono),
C    para cálculo de cgama e calfa, em cada T. DELTAC = incrementos
C    de con-
C    centração de C na austenita (em % em massa) para cálculo da
C    concen-
C    tração de equilíbrio na ferrita.
C    CGINI: composição do aço (% em massa), é uma variável auxiliar.
C
    SUBROUTINE PHBOUN(CGINI,TRI,C0,CMAX,WGEMAX,NEQUI)
    IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
    COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIIF(7),EIK(15),YI(15)
    COMMON /COEF2/A(7),B(7),C(7),D(7),PM(8),P(7),Q(7),EIIA(7),
*    CGAMA(15),CALFA(15),XGAMA(15),XALFA(15),XG(15),IEL(10)
    COMMON /KIRK/EQUIL(200,5),XALFI(8),NEQ
    COMMON /CONV/EPS1,EPS2,H,ITMAX,N,IMP
    COMMON /DILATB/DILAT(700,2),XA(700,10)
    DIMENSION CGINI(8)
    DATA RCONS,DELTAC/8.314,0.025/
C
C    Abre arquivo e imprime dados iniciais
    OPEN(14,FILE='EQUILI.DAT',STATUS='UNKNOWN')
    WRITE(14,70) (IEL(I),I=1,N)

```

```

WRITE(14,75) (CGAMA(I),I=1,N)
WRITE(14,80)
C
NM1=N+1
NEQ=INT((CMAX-C0)/DELTAC+0.5)+1
CGAMA(1)=C0-DELTAC
C
DO 40 J=1,NEQ
C
C Recálculo das concentrações em massa na austenita
CGAMA(1)=CGAMA(1)+DELTAC
IF(CGAMA(1).GT.CMAX) CGAMA(1)=CMAX
XMCA=DELTAC/(1-CGAMA(1)/100)
XMT=100+XMCA
DO 20 I=2,NM1
20 CGAMA(I)=CGAMA(I)*100/XMT
C
C Transformação em fração molar na austenita
ISEN=1
IFASE=3
CALL MOLAR(ISEN,IFASE,N)
EQUIL(J,2)=CGAMA(1)
EQUIL(J,4)=XGAMA(1)
C
C Cálculo da temperatura e da concentração de C na ferrita em
equilíbrio
IEQ=0
TR=TRI
DO 30 I=1,NM1
30 XALFA(I)=XALFI(I)
CALL CALTAE3(TR,RCONS,TEQU)
C
C Armazenamento dos valores de equilíbrio
EQUIL(J,1)=TEQU
EQUIL(J,3)=CALFA(1)
C
40 CONTINUE
C
C Chama cálculo da linha Acm
CALL KACEM(CGINI,WGEMAX,N,NEQUI)
C
C Extrapolação da linha de concentração na ferrita para pontos
abaixo de NEQ, (extrapolação linear)
T0=EQUIL(1,1)
Y0=EQUIL(1,3)
XM=(EQUIL(NEQ,3)-Y0)/(EQUIL(NEQ,1)-T0)
J=NEQ
T=EQUIL(NEQ,1)
45 J=J+1
T=T-10
EQUIL(J,3)=Y0+XM*(T-T0)
IF(J.LT.NEQUI) GO TO 45
C
C Retorna valores originais de cgama
DO 50 I=1,NM1
50 CGAMA(I)=CGINI(I)
C
C Imprime resultados
DO 60 J=1,NEQUI

```

```

60 WRITE(14,90) (EQUIL(J,K),K=1,5)
70 FORMAT(5X,'RESULTADOS DE CÁLCULOS DE EQUILÍBRIO',/,3X,'ELEMENTOS
P
*RESENTES NO
AÇO:' ,8(I2,3X),/2X,'C',3X,'Mn',4X,'Si',4X,'Ni',4X,'Cr'
*,4X,'Mo',4X,'Cu',/)
75 FORMAT(7(4X,F7.3))
80
FORMAT(/,6X,'T(°C)',4X,'CGAMA(%)',4X,'CALFA(%)',4X,'XGAMA',4X,'%CA
*CM')
90 FORMAT(5X,F6.1,4X,F7.5,4X,F7.5,4X,F7.5,4X,F7.5)
C
RETURN
END
C
SUBROTINA KACEM
C
*****
C Cálculo da linha de equilíbrio austenita/cementita de aços com
pe-
C quenas adições de C,Mn,Si,Ni,Cr,Mo, de acordo com a fórmulação de
C Kirkaldy,baseando-se em dados termodinâmicos.Formulação obtida do
C livro "Hardenability ..." Considera-se que a variável xlc seja a
C concentração calculada pela regressão polinomial.
C Dimensionamento de arranjos e leitura de dados
C
*****
C
SUBROUTINE KACEM(CGINI,WGEMAX,N,NEQUI)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /COEF/XOLD(15),AM(15,16),EIIF(7),EIK(15),YI(15)
COMMON /COEF2/A(7),B(7),C(7),D(7),PM(8),P(7),Q(7),EIIA(7),
* CGAMA(15),CALFA(15),XGAMA(15),XALFA(15),XG(15),IEL(10)
COMMON /KIRK/EQUIL(200,5),XALFI(8),NEQ
DIMENSION XK(7),CGINI(8)
DATA XGCEM,WGE0,DELTAW/0.25,1.0,0.025/
C
Retorna valores originais de cgama
NM1=N+1
DO 10 I=1,NM1
10 CGAMA(I)=CGINI(I)
I=0
C
15 I=I+1
IF(I.LE.NEQ) THEN
TEQU=EQUIL(I,1)
C Determinação do teor de carbono na linha Acm gama-Fe3C (X1c)
para a
C temperatura de TEQU, por Newton-Raphson
ICONT=0
20 CONTINUE
ICONT=ICONT+1
YT0=TEQU-11.661*(WGE0**3)+120.81*WGE0*WGE0-581.37*WGE0-349.09
DTY=-34.983*WGE0*WGE0+241.63*WGE0-581.37
WGE=WGE0-YT0/DTY
T=11.661*(WGE**3)-120.81*WGE*WGE+581.37*WGE+349.09
IF(DABS(WGE0-WGE).LT.0.0001) GO TO 30
WGE0=WGE

```

```

      GO TO 20
30  CONTINUE
      IF(ICONTE.EQ.1) WGE=WGE0
      ELSE
C
C      Extrapolação da linha Acm para valores de WGE acima do valor
cor-
C      respondente à última temperatura, EQUIL(NEQ,1).
      WGE=WGE-DELTAW
      TEQU=11.661*(WGE**3)-120.81*WGE*WGE+581.37*WGE+349.09
      EQUIL(I,1)=TEQU
      END IF
C
C      Determinação dos coeficientes de partição e de interação de
Wagner
      XK(2)=-0.00284*TEQU+5.44
      XK(3)=0
      XK(4)=0.0004*TEQU-0.249
      XK(5)=163.4-22.78*ALOG(TEQU)
      XK(6)=121-16.91*ALOG(TEQU)
      XK(7)=0
C      Correção de XK para N<7
      DO 40 J=3,N
      NEL=IEL(J)
40  XK(J)=XK(NEL)
C
      TK=TEQU+273
      DO 50 J=2,N
50  EIK(J)=P(J)+Q(J)/TK
      EIIA(1)=8910/TK
C
C      Transformação de % em massa para fração molar de C na austenita
      PMC=WGE/12
      XGE=PMC/(PMC+(100-WGE)/55.84)
      CGAMA(1)=WGE
      CALL MOLAR(1,3,N)
C      Cálculo do segundo termo da equação
      SOMI=0
      DO 60 J=2,N
      PII=XK(J)+(1+EIK(J))*(XGCEM-XGE)-1
60  SOMI=SOMI+PII*XGAMA(J)
C
      XNUM=SOMI*XGE
      DEN=XGCEM+XGE*((1+EIIA(1))*(XGCEM-XGE)-1)
C
C      Determinação da nova concentração de equilíbrio
      XGE1=XGE-XNUM/DEN
C      Transformação da fração molar do C em % em massa - na austenita
C      e armazenamento do resultado - (total de moles na mistura é 1)
      CGAME=1.7908*XGE1/(XGE1/55.84+1./12.-XGE1/12.)
      EQUIL(I,5)=CGAME
      IF(WGE.GT.WGEMAX) GO TO 15
      NEQUI=I
C
      RETURN
      END
C
C      SUBROTINA RALAV

```

```

C    Cálculo da fração transformada pela regra da alavanca,
armazenamento
C    de valores em XA(J,9), do enriquecimento da austenita, em
XA(J,10) e
C    da temperatura Ar1 pelo enriquecimento
      SUBROUTINE RALAV(CGINI,CC,AR1RL,XAR1RL,NPON)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /DILATB/DILAT(700,2),XA(700,10)
      COMMON /DILPC/AR3,DILAR3,ARF,DILARF,XINCG,XINCA
      DIMENSION CGINI(8),CC(700)

C
C    Cálculo da fração transformada
DO 10 J=1,NPON
  YG=DILAR3+XINCG*(DILAT(J,1)-AR3)
  YP=DILARF+XINCA*(DILAT(J,1)-ARF)
10  XA(J,9)=(DILAT(J,2)-YG)/(YP-YG)
C    Cálculo do enriquecimento da austenita durante a transformação e
C    de Ar1
  AR1=0
  DO 30 J=1,NPON
  IF(XA(J,1).GT.1) GO TO 30
  T=DILAT(J,1)
C    Austenita enriquecida: XA(J,10)
  IF(T.GE.AR1) XA(J,10)=(CGINI(1)-XA(J,9)*XA(J,5))/(1-XA(J,9))
C    Valor de Ar1
C    Ar1 acima de Ael
  IF(AR1.NE.0.OR.XA(J,6).GT.XA(J,10)) GO TO 20
  XMG=(XA(J,6)-XA(J-1,6))/(T-DILAT(J-1,1))
  XMEN=(XA(J,10)-XA(J-1,10))/(T-DILAT(J-1,1))
  CAR1=(XMEN*XA(J-1,10)-XMG*XA(J-1,6))/(XMEN-XMG)
  AR1=DILAT(J-1,1)+XMEN*(CAR1-XA(J-1,10))
C    Fração transformada em AR1
  XAR1RL=XA(J-1,9)+(XA(J,9)-XA(J-1,9))*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-
DILAT(J
  *      -1,1))
  JAR1=J
  GO TO 30
C    Ar1 abaixo de Ael
20  CONTINUE
  IF(AR1.NE.0.OR.CC(J).GT.XA(J,10)) GO TO 30
  XMC=(CC(J)-CC(J-1))/(T-DILAT(J-1,1))
  XMEN=(XA(J,10)-XA(J-1,10))/(T-DILAT(J-1,1))
  CAR1=(XMEN*XA(J-1,10)-XMC*CC(J-1))/(XMEN-XMC)
  AR1=DILAT(J-1,1)+XMEN*(CAR1-XA(J-1,10))
C    Fração transformada em AR1
  XAR1RL=XA(J-1,9)+(XA(J,9)-XA(J-1,9))*(AR1-DILAT(J-1,1))/(T-
DILAT(J
  *      -1,1))
  JAR1=J
30  CONTINUE
C
  AR1RL=AR1
  RETURN
  END

```

17.2. Rotina de Cálculos Termodinâmicos de Acordo com Miettinen

```

C
*****
C   Cálculo das linhas de equilíbrio gama/alfa, gama/cementita e
C   alfa/
C   cementita, para aços com adições de Mn,Si,Cr,Mo e Ni, de acordo
C   com
C   as formulações e banco de dados de Miettinen. A composição
C   química
C   do aço e as soluções iniciais para o C para as quatro linhas
C   calcu-
C   ladas precisam ser fornecidos, uma vez que as soluções são
C   numéricas.
C   A ordem dos elementos no aço é a seguinte: Fe,C,Mn,Si,Cr,Mo,Ni.
C   Pode ser usado qualquer número de elementos no aço, mas é
C   necessário
C   citar o número e os seus índices, que são na ordem 1,2,...7,
C   confor-
C   me ordem acima
C   Dimensionamento de arranjos e leitura de dados
C
*****
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      REAL*8 KM(7)
      COMMON /GIBBS/DGGAM(7),DGALF(7),ATGAM(21),ATALF(21),DGCAR(7),
*          PLFE(7),PX(7),APX,SAAD1,SAFD1,SDUPA,SDUPF
      COMMON /COEFAM/XOLD(2),AM(2,3)
      COMMON /VAR1/TK,RCONS,NEL
      COMMON /CONC/PM(7),CGAMA(7),CALFA(7),XGAMA(7),XALFA(7),XG(7),
*          IEL(7)
      COMMON /CONV/EPS1,EPS2,H,ITMAX,IPRINT
      COMMON /POT/POTGAM(7),POTALF(7)
      DIMENSION POTCAR(7),YMC(7)
C
C   Dados de pesos moleculares dos elementos
C   DATA PM/55.84,12.,54.94,28.08,51.996,95.9,58.763/
C   DATA RCONS/8.314/
C   Leitura de dados
C   OPEN(11, FILE='EntMiet.TXT',STATUS='OLD')
C   READ(11,*) NEL,(IEL(I),I=1,NEL)
C   READ(11,*) (CGAMA(I),I=2,NEL)
C
C   Condições de resolução do sistema não linear de duas equações,
C   ,equilíbrio austenita/ferrita, e das equações não lineares para
C   equilíbrio austenita/cementita e ferrita/cementita
C   READ(11,*) ITMAX,IPRINT,EPS1,EPS2,H
C   READ(11,*) XCIA,XCIF
C   READ(11,*) XCIA2,XCIF2
C   WRITE(*,*) 'ENTRE CÓDIGO PARA DEFINIR QUAIS LINHAS DE EQUILÍBRIO
A
* CALCULAR: 1: TODAS; 2: G/CEM e A/CEM; 3: G/A'
C   READ(*,*) ICOD
C
C   Impressão dos dados de entrada
C   OPEN(12,FILE='ResMiet.DAT',STATUS='UNKNOWN')
C   OPEN(13,FILE='Sol_NR.DAT',STATUS='UNKNOWN')
C   WRITE(12,1)

```

```

WRITE(12,2) ITMAX,NEL, EPS1, EPS2, H
WRITE(12,3) (CGAMA(I), I=2, NEL)
WRITE(12,4) (IEL(I), I=1, NEL)
WRITE(12,5)
1 FORMAT(/, 2X, 'CÁLCULO DAS LINHAS DE EQUILÍBRIO DO DIGRAMA FERRO-
CA
*RBONO PARA AÇOS CMnSiCrMoNi, '/, 2X, 'DE ACORDO COM A CONDIÇÃO DE
PAR
*AEQUILÍBRIO, FORMULADA POR MIETTINEN', //)
2 FORMAT(4X, 'ITMAX = ', I3, 4X, 'NEL = ', I2, 4X, 'EPS1 =
', E10.4, 4X, 'EPS2
* = ', E10.4, 4X, 'H = ', F6.4, /, 10X, 'CINICIAL(I), I=2, NEL')
3 FORMAT(6(4X, F10.4))
4 FORMAT(/, 2X, 'ELEMENTOS PRESENTES: ', 7(4X, I1))
5 FORMAT(/, 4X, 'EQUILÍBRIO
AUSTENITA/FERRITA', /, 6X, 'T(°C)', 4X, 'CGAMA
*(%)', 4X, 'CALFA(%)')
C
C Ajuste dos pesos moleculares para o caso de N < 7
IF(NEL.LT.4) WRITE(*,*) 'NUMERO INSUFICIENTE DE ELEMENTOS'
IF(NEL.EQ.4.OR.NEL.EQ.7) GO TO 20
DO 10 J=5, NEL
JJ=IEL(J)
10 PM(J)=PM(JJ)
20 CONTINUE
C Transformação da concentração em massa para fração molar na
C austenita
ISEN=1
IFASE=3
CALL MOLAR(ISEN, IFASE, NEL)
C
C Cálculo dos coeficientes de partição e dos parâmetros Px
DO 22 M=3, NEL
22 KM(M)=XGAMA(M)/XGAMA(1)
SOMPX=0
DO 24 M=3, NEL
24 SOMPX=SOMPX+KM(M)
DO 26 J=3, NEL
26 PX(J)=KM(J)/(1+SOMPX)
SAPX=0
DO 28 M=3, NEL
28 SAPX=SAPX+PX(M)
APX=1-SAPX
C
IF(ICOD.EQ.2) GO TO 1000
C
C CÁLCULO DO EQUILÍBRIO AUSTENITA/FERRITA
WRITE(*,*) 'Entre com TI, TF e DELTAT, para o equilíbrio
austenita/
*ferrita, numa linha'
READ(*,*) TI, TF, DELTAT
C Início dos cálculos para cada temperatura
TC=TI+DELTAT
30 TC=TC-DELTAT
TK=TC+273
C Chama cálculos de variações de energia livre padrão
CALL DELTAG(TK)
C Chama parâmetros de interação
CALL PARINT(TK)

```

```

C      Calcula somatórios necessários para cálculos subsequentes
      CALL SOMA(IEL)
C      Monta e resolve o sistema de equações não lineares, para cada
tem-
C      peratura
      XOLD(1)=XCIA
      XOLD(2)=XCIF
C
      CALL NLINRP(IEL)
C
C      Concentrações em fração molar na austenita e na ferrita
      XGAMA(1)=APX*(1-XOLD(1))
      XGAMA(2)=XOLD(1)
      XALFA(1)=APX*(1-XOLD(2))
      XALFA(2)=XOLD(2)
      DO 32 J=3,NEL
      XGAMA(J)=(1-XOLD(1))*PX(J)
32 XALFA(J)=(1-XOLD(2))*PX(J)
C      Transformação para concentração em massa
      CALL MOLAR(2,1,NEL)
C      Imprime valores de temperatura e das concentrações
      WRITE(12,34) TC,CGAMA(2),CALFA(2)
34 FORMAT(5X,F6.1,4X,F7.5,4X,F7.5)
C      Determina os potenciais químicos para cálculos futuros
      CALL POTENC(IEL)
C
      IF(TC.GT.TF) GO TO 30
C
      IF(ICOD.EQ.3) GO TO 250
1000 CONTINUE
C
C      EQUILÍBRIO AUSTENITA/CEMENTITA
C
      WRITE(*,*) 'Entre com TI,TF,DELTAT, para austenita/cementita,
numa
      * linha'
      READ(*,*) TI,TF,DELTAT
      WRITE(12,36)
36 FORMAT(//,5X,'EQUILÍBRIO
AUSTENITA/CEMENTITA',/,5X,'CGAMA(%)',4X,'
*(°C)')
      SYMC=0
      DO 40 M=3,NEL
      YMC(M)=PX(M)
40 SYMC=SYMC+YMC(M)
      YMC(1)=1-SYMC
C
C      Para efeito de utilização das rotinas de cálculo de potencial, é
C      adotado um valor arbitrário para XOLD(2), pois ele não entra,
efe-
C      tivamente no cálculo do equilíbrio austenita/cementita
C      Início do loop de temperatura
      XOLD(2)=0.001
      TC=TI+DELTAT
50 TC=TC-DELTAT
      TK=TC+273
C      Cálculo dos potenciais dos carbonetos
      CALL PARCEM(TK)
      SPAR=0

```

```

        DO 55 I=3,NEL
            II=IEL(I)
55 SPAR=SPAR+PLFE(II)*YMC(I)
C
        POTCAR(1)=DGCAR(1)+3*RCONS*TK*ALOG(YMC(1))+(1-YMC(1))*SPAR
        DO 60 I=3,NEL
            II=IEL(I)
60 POTCAR(II)=DGCAR(II)+3*RCONS*TK*ALOG(YMC(I))+YMC(I)*(PLFE(II)-
SPAR
*)
C    Início do loop de solução por Newton-Raphson
C
        CALL DELTAG(TK)
        CALL PARINT(TK)
        CALL SOMA(IEL)
        ILOOP=0
        XCGI=XCIA2
        XOLD(1)=XCGI
70 CONTINUE
        ILOOP=ILOOP+1
        INDER = 1
80 CONTINUE
C    Cálculo dos potenciais químicos dos elementos
        CALL POTENC(IEL)
C    Função fi
        XCF=APX*(1-XOLD(1))
        PTER=XCF*(POTCAR(1)-3*POTGAM(1)-POTGAM(2))
        STER=0
        DO 90 M=3,NEL
            MM=IEL(M)
            XCM=(1-XOLD(1))*PX(M)
90 STER=STER+XCM*(POTCAR(MM)-3*POTGAM(MM)-POTGAM(2))
        FITE=PTER+STER
C
C    Determinação da derivada numérica de fi
        IF(INDER.EQ.2) GO TO 100
        FITE1=FITE
        INDER=2
        XOLD(1)=XOLD(1)+H
        GO TO 80
100 FITE2=FITE
        FITEM=(FITE1+FITE2)/2
        FILIN=(FITE2-FITE1)/H
        XNOV=XCGI-FITEM/FILIN
C
C    Checagem de convergência
        IF(DABS(XNOV-XCGI).LT.0.0001) GO TO 110
        XOLD(1)=XNOV
        XCGI=XNOV
        GO TO 70
C
110 CONTINUE
C
C    Transformação para porcentagem em massa na austenita e
impressão
        XGAMA(1)=XCF
        XGAMA(2)=XNOV
        DO 120 I=3,NEL
120 XGAMA(I)=(1-XNOV)*PX(I)

```

```

        CALL MOLAR(2,3,NEL)
        WRITE(12,130) CGAMA(2),TC
130  FORMAT(4X,F7.5,4X,F6.1)
C
        IF(TC.GT.TF) GO TO 50
C
C      EQUILIBRIO FERRITA/CEMENTITA
C
C
        WRITE(*,*) 'Entre com TI,TF,DELTAT, para ferrita/cementita, numa
        *linha'
        READ(*,*) TI,TF,DELTAT
        WRITE(12,140)
140  FORMAT(/,5X,'EQUILÍBRIO
FERRITA/CEMENTITA',/,5X,'CALFA(%)',4X,'T(
        *°C)')
C      Início do loop de temperatura
C      Valor arbitrário de XOLD(2), dado que ele não influi nos
cálculos
        XOLD(1)=0.01
        TC=TI+DELTAT
150  TC=TC-DELTAT
        TK=TC+273
C      Cálculo dos potenciais dos carbonetos
        CALL PARCEM(TK)
        SPAR=0
        DO 160 I=3,NEL
            II=IEL(I)
160  SPAR=SPAR+PLFE(II)*YMC(I)
C
        POTCAR(1)=DGCAR(1)+3*RCONS*TK*ALOG(YMC(1))+(1-YMC(1))*SPAR
        DO 170 I=3,NEL
            II=IEL(I)
170  POTCAR(II)=DGCAR(II)+3*RCONS*TK*ALOG(YMC(I))+YMC(I)*(PLFE(II)-
SPAR
        *)
C      Início do loop de solução por Newton-Raphson
        CALL DELTAG(TK)
        CALL PARINT(TK)
        CALL SOMA(IEL)
        ILOOP=0
        XCGI=XCIF2
        XOLD(2)=XCGI
180  CONTINUE
        ILOOP=ILOOP+1
        INDER = 1
190  CONTINUE
C      Cálculo dos potenciais químicos dos elementos
        CALL POTENC(IEL)
C
C      Função fi
        XCF=APX*(1-XOLD(2))
        PTER=XCF*(POTCAR(1)-3*POTALF(1)-POTALF(2))
        STER=0
        DO 200 M=3,NEL
            MM=IEL(M)
            XCM=(1-XOLD(2))*PX(M)
200  STER=STER+XCM*(POTCAR(MM)-3*POTALF(MM)-POTALF(2))
        FITE=PTER+STER

```

```
C
C      Determinação da derivada numérica de fi
      IF(INDER.EQ.2) GO TO 210
      FITE1=FITE
      INDER=2
      XOLD(2)=XOLD(2)+H
      GO TO 190
210  FITE2=FITE
      FITEM=(FITE1+FITE2)/2
      FILIN=(FITE2-FITE1)/H
      XNOV=XCGI-FITEM/FILIN
C
C      Checagem de convergência
      IF(DABS(XNOV-XCGI).LT.0.00001) GO TO 220
      XOLD(2)=XNOV
      XCGI=XNOV
      GO TO 180
C
220  CONTINUE
C
C      Transformação para porcentagem em massa na austenita e impressão
      XALFA(1)=XCF
      XALFA(2)=XNOV
      DO 230 I=3,NEL
230  XALFA(I)=(1-XNOV)*PX(I)
      CALL MOLAR(2,2,NEL)
      WRITE(12,240) CALFA(2),TC
240  FORMAT(4X,F7.5,4X,F6.1)
C
      IF(TC.GT.TF) GO TO 150
C
250  CONTINUE
      END
C
C      Início das subrotinas
C
C      SUBROTINA MOLAR
C
C      Transformação entre concentrações em massa e fração molar
C      ISEN=1 (massa>molar); ISEN/=1 (molar>massa)
C      IFASE=1 (ferrita+austenita); IFASE=2 (ferrita); IFASE=3
(austenita)
C
      SUBROUTINE MOLAR(ISEN,IFASE,N)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /CONC/PM(7),CGAMA(7),CALFA(7),XGAMA(7),XALFA(7),XG(7),
*          IEL(7)
C
      IF(ISEN.EQ.1) THEN
      IF(IFASE.NE.1.AND.IFASE.NE.2) GO TO 40
C
C      Cálculo das frações molares na ferrita
      SOMAM=0
      DO 10 I=2,N
10  SOMAM=SOMAM+CALFA(I)
      CALFA(1)=100-SOMAM
      XSOMA = 0
      DO 20 I = 1,N
```

```

      XG(I)=CALFA(I)/PM(I)
20  XSOMA=XSOMA+XG(I)
      SOMAX=0
      DO 30 I = 2,N
      XALFA(I)=XG(I)/XSOMA
30  SOMAX=SOMAX+XALFA(I)
      XALFA(1)=1-SOMAX
      IF(IFASE.EQ.2) GO TO 130
C
C   Cálculo das frações molares na austenita
40  SOMAM=0
      DO 50 I=2,N
50  SOMAM=SOMAM+CGAMA(I)
      CGAMA(1)=100-SOMAM
      XSOMA = 0
      DO 60 I = 1,N
      XG(I)=CGAMA(I)/PM(I)
60  XSOMA=XSOMA+XG(I)
      SOMAX=0
      DO 70 I = 2,N
      XGAMA(I)=XG(I)/XSOMA
70  SOMAX=SOMAX+XGAMA(I)
      XGAMA(1)=1-SOMAX
C
C   Conversão de fração molar para concentração em massa. (XG(I) é a
C   massa de cada espécie, considerando-se que o número total de
C   moles na mistura é 1)
      ELSE
      IF(IFASE.NE.1.AND. IFASE.NE.2) GO TO 100
C
C   Concentração em massa na ferrita
      SOMX=0
      DO 80 I=1,N
      XG(I)=PM(I)*XALFA(I)
80  SOMX=SOMX+XG(I)
      DO 90 I=1,N
90  CALFA(I)=XG(I)/SOMX*100
      IF(IFASE.EQ.2) GO TO 130
C
C   Concentração em massa na austenita
100 SOMX=0
      DO 110 I=1,N
      XG(I)=PM(I)*XGAMA(I)
110 SOMX=SOMX+XG(I)
      DO 120 I=1,N
120 CGAMA(I)=XG(I)/SOMX*100
C
      END IF
130 CONTINUE
      RETURN
      END
C
C   SUBROTINA DELTAG
C   Cálculo da variação de energia livre dos elementos na austenita
C   e na ferrita (J/mol) em função da temperatura (K) - A ordem dos
C   elementos é a citada no cabeçalho deste programa.
C
      SUBROUTINE DELTAG(TK)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)

```

```

COMMON /GIBBS/DGGAM(7), DGALF(7), ATGAM(21), ATALF(21), DGCAR(7),
*      PLFE(7), PX(7), APX, SAAD1, SAFD1, SDUPA, SDUPF
C
T=TK
DGGAM(1)=-236.7+132.416*T-24.6643*T*ALOG(T)-0.00375752*T*T
*      -5.89269E-08*T*T*T+77358.5/T
DGGAM(2)=25167.96+154.863*T-24.3*T*ALOG(T)-0.0004723*T*T
*      +2562600/T-2.643E08/(T*T)+1.2E10/(T*T*T)
DGGAM(3)=11460.3+135.749*T-24.5177*T*ALOG(T)-0.006*T*T+69600.1/T
DGGAM(4)=135211.61+156.5529*T-22.83175*T*ALOG(T)-0.0019129*T*T
*      -3.552E-09*T*T*T+176667/T
DGGAM(5)=7850.06+150.166*T-26.908*T*ALOG(T)+0.00189435*T*T
*      -1.47721E-06*T*T*T+139250/T
DGGAM(6)=35800.7+114.8587*T-23.56414*T*ALOG(T)-0.0034434*T*T
*      +5.662834E-07*T*T*T-1.309265E-10*(T**4)+65812.39/T
DGGAM(7)=6877.16+116.678*T-22.096*T*ALOG(T)-0.0048407*T*T
C
Ferrita
IF(T.GE.1043) THEN
DGALF(1)=-349776.66+337.8512*T-3.80089*T*ALOG(T)-0.13419242*T*T
*      -6.434213E-06*T*T*T+8.880313E-09*(T**4)+86685570/T
*      +8.697221E10/(T*T)-4.599974E13/(T*T*T)
ELSE
DGALF(1)=220094.78-2834.7476*T+435.40912*T*ALOG(T)-
0.54774302*T*T
*      +1.756482E-04*T*T*T-3.336821E-08*(T**4)-33197730/T
*      +3.516288E09/(T*T)-1.750764E11/(T*T*T)
END IF
DGALF(2)=-1370318.3+18094.7539*T-2770.94409*T*ALOG(T)
*      +2.99752855*T*T-8.732139E-04*T*T*T+1.381917E-07*(T**4)
*      +223761900/T-2.430905E10/(T*T)+1.226854E12/(T*T*T)
DGALF(3)=3343702.8-25398.0667*T+3415.07471*T*ALOG(T)
*      -0.26046523*T*T-1.050102E-03*T*T*T+3.567455E-07*(T**4)
*      -716037200/T+9.7755138E10/(T*T)-5.824741E12/(T*T*T)
DGALF(4)=-3443348.3+45953.5977*T-7170.32031*T*ALOG(T)
*      +8.8958149*T*T-2.944186E-03*T*T*T+5.294382E-07*(T**4)
*      +438511400/T-4.142475E10/(T*T)+1.816135E12/(T**3)
DGALF(5)=-2064915.1+27712.1367*T-4296.36621*T*ALOG(T)
*      +5.07407093*T*T-1.612089E-03*T*T*T+2.796675E-07*(T**4)
*      +292560200/T-2.946338E10/(T*T)+1.385453E12/(T*T*T)
DGALF(6)=-2326140.3+31059.959*T-4808.40576*T*ALOG(T)
*      +5.62459707*T*T-1.769428E-03*T*T*T+3.043325E-07*(T**4)
*      +335008000/T-3.413544E10/(T*T)+1.623841E12/(T*T*T)
DGALF(7)=-3631483+48815.1172*T-7578.41992*T*ALOG(T)
*      +9.06838512*T*T-2.909107E-03*T*T*T+5.090248E-07*(T**4)
*      +505397000/T-5.027311E10/(T*T)+2.332825E12/(T*T*T)
RETURN
END
C
C
SUBROTINA PARINT
C
Cálculo dos parâmetros de interação (RTij) na austenita e na
C
ferrita (J/mol) em função da temperatura (K). Os valores são
C
armazenados num vetor representando a metade superior da matriz
C
simétrica destes coeficientes, totalizando 21 termos. Mas falta
C
o parâmetro MnMo, o qual foi tomado como nulo.
C
C
SUBROUTINE PARINT(TK)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /GIBBS/DGGAM(7), DGALF(7), ATGAM(21), ATALF(21), DGCAR(7),
*      PLFE(7), PX(7), APX, SAAD1, SAFD1, SDUPA, SDUPF

```

C

```

T=TK
ATGAM(1)=69342+16.629*T
ATGAM(2)=-48117+7.99*T
ATGAM(3)=17078-7.730*T
ATGAM(4)=-9098+74.571*T
ATGAM(5)=-3032-97.653*T
ATGAM(6)=207674-82.232*T
ATGAM(7)=-144339+31.305*T
ATGAM(8)=-12106+10.761*T
ATGAM(9)=10080-23.784*T
ATGAM(10)=-13206+14.954*T
ATGAM(11)=-131346+26.375*T
ATGAM(12)=0
ATGAM(13)=12596-23.425*T
ATGAM(14)=-36360+25.168*T
ATGAM(15)=-56694+35.382*T
ATGAM(16)=29534+9.633*T
ATGAM(17)=-57810+12.639*T
ATGAM(18)=-28139+8.309*T
ATGAM(19)=8665-9.560*T
ATGAM(20)=-236266+181.29*T
ATGAM(21)=-35124+20.152*T

```

C

```

Ferrita
ATALF(1)=53.308*T
ATALF(2)=-93432+41.264*T
ATALF(3)=23248-100.245*T+0.04751*T*T
ATALF(4)=87373-2.605*T
ATALF(5)=-33211-44.776*T
ATALF(6)=259335-86.444*T-0.02230*T*T
ATALF(7)=-392183+200.57*T
ATALF(8)=-44065+27.177*T
ATALF(9)=27775-26.945*T
ATALF(10)=-39060+10.651*T+0.00506*T*T
ATALF(11)=-592502+331.40*T
ATALF(12)=0
ATALF(13)=44131-25.891*T
ATALF(14)=-27704+22.307*T
ATALF(15)=-44967+78.571*T-0.03807*T*T
ATALF(16)=23078+5.963*T
ATALF(17)=-51500+7.548*T
ATALF(18)=28504-41.335*T
ATALF(19)=-8624+5.047*T
ATALF(20)=-28036+25.734*T
ATALF(21)=-7757+3.731*T+0.00549*T*T
RETURN
END

```

C

SUBROTINA SOMA

C

Cálculo de somatórios usados nos potenciais e suas derivadas

C

```

SUBROUTINE SOMA(IEL)
IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /GIBBS/DGGAM(7),DGALF(7),ATGAM(21),ATALF(21),DGCAR(7),
*      PLFE(7),PX(7),APX,SAAD1,SAFD1,SDUPA,SDUPF
COMMON /VAR1/TK,RCONS,NEL
DIMENSION IEL(7)

```

C

Cálculos dos somatórios necessários para as equações não lineares

```

C      e suas derivadas
      SAAD1=0
      SAFD1=0
      SDUPA=0
      SDUPF=0
      I=1
      DO 40 J=3,NEL
      JJ=IEL(J)
      IPOS=(JJ-1)*(JJ-2)/2+I
      SAAD1=SAAD1+ATGAM(IPOS)*PX(J)
40    SAFD1=SAFD1+ATALF(IPOS)*PX(J)
C
      DO 50 I=3,NEL
      II=IEL(I)
      DO 50 J=3,NEL
      JJ=IEL(J)
      IF(JJ.LT.II) THEN
      IP=II
      II=JJ
      JJ=IP
      END IF
      IPOS=(JJ-1)*(JJ-2)/2+(II-1)
      SDUPA=SDUPA+ATGAM(IPOS)*PX(I)*PX(J)
50    SDUPF=SDUPF+ATALF(IPOS)*PX(I)*PX(J)
C
      RETURN
      END

C
C      SUBROTINA NLINRP
C
C      Monta e resolve o sistema de equações não lineares pelo método de
C      Newton-Raphson, adaptado para o problema de equilíbrio austenita/
C      ferrita - Rotinas do livro de Carnahan -
C      Este programa resolve um sistema de N equações simulatâneas não
line-
C      ares. Os valores iniciais do vetor incógnita são entrados em
XOLD(1)..
C      ...XOLD(N). O programa chama primeiro a rotina CALCN para
computar os
c      elementos de A, que é a matriz aumentada das derivadas parciais,
depois
c      chama a subrotina SIMUL para resolver o sistema de equações
lineares
c      gerado para os incrementos nos valores da solução
XINC(1)...XINC(N).
c      DETER é o Jacobiano computado por SIMUL. As soluções são
atualizadas
c      e o processo continua até que, ITER, o número de iterações excede
ITMAX
c      ou até que a variação nas N variáveis seja menor que EPS2 (ITCON
= 1,
c      neste caso). EPS1 é a mínima magnitude do PIVOT permitida em
SIMUL.
c      Quando IPRINT = 1, valores intermediários de solução são
impressos
c      após cada iteração.
C
      SUBROUTINE NLINRP( IEL)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)

```

```

COMMON /GIBBS/DGGAM(7), DGALF(7), ATGAM(21), ATALF(21), DGCAR(7),
*      PLFE(7), PX(7), APX, SAAD1, SAFD1, SDUPA, SDUPF
COMMON /COEFAM/XOLD(2), AM(2,3)
COMMON /VAR1/TK, RCONS, NEL
COMMON /CONV/EPS1, EPS2, H, ITMAX, IPRINT
COMMON /POT/POTGAM(7), POTALF(7)
DIMENSION XINC(2), IEL(7)

C
C   Iteração de Newton-Raphson
C   N=2
C   DO 30 ITER=1,ITMAX
C   Chama o cálculo dos potenciais químicos
C   CALL POTENC(IEI)
CCCC
C   WRITE(*,*) 'PASSOU POTENC'
C   Chama CALCN para estabelecer os coeficientes nxn da matriz AM
C   CALL CALCN(IEI)
C
C   Chama SOVLIN para computar o Jacobiano e correções em XINC
C   CALL SOLVLIN(EPS1,N,1,SIMUL,DETER,XINC)
CCCC
C   WRITE(13,500) (XINC(I),I=1,2)
500  FORMAT(2(4X,E10.4))
C
C   IF(DETER.NE.0) GO TO 10
C   WRITE(13,201)
C
C   VERIFICAÇÃO DE CONVERGÊNCIA E ATUALIZAÇÃO DE VALORES
10  ITCON = 1
C   DO 20 I=1,N
C   IF(ABS(XINC(I)).GT.EPS2) ITCON =0
20  XOLD(I)=XOLD(I)+XINC(I)
C   IF(IPRINT.EQ.1) WRITE(13,202) ITER,DETER,(XOLD(I),I=1,N)
C   IF(ITCON.EQ.0) GO TO 30
C   WRITE(13,203) ITER,(XOLD(I),I=1,N)
C   GO TO 40
30  CONTINUE
C
C   WRITE(13,204)
C
C   40 CONTINUE
201  FORMAT(5X,'MATRIZ MAL CONDICIONADA OU SINGULAR')
202  FORMAT(5X,'ITER = ',I3,4X,'DETER = ',E14.4,/,5(4X,F10.7))
203  FORMAT(5X,'SOLUÇÃO CONVERGIU',4X,'ITER = ',I3,/,5(4X,F10.7))
204  FORMAT(5X,'NÃO CONVERGÊNCIA')
C
C   RETURN
C   END
C
C   SUBROTINA POTENC
C   Determinação dos potenciais químicos do Fe,C,Mn,Si,Cr,Mo e Ni,
C   nesta ordem, nas fases gama e alfa, em função da temperatura e
C   da composição destas fases.
C
C   SUBROUTINE POTENC(IEI)
C   IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
COMMON /GIBBS/DGGAM(7), DGALF(7), ATGAM(21), ATALF(21), DGCAR(7),
*      PLFE(7), PX(7), APX, SAAD1, SAFD1, SDUPA, SDUPF
COMMON /COEFAM/XOLD(2), AM(2,3)

```

```

COMMON /POT/POTGAM(7),POTALF(7)
COMMON /VAR1/TK,RCONS,NEL
DIMENSION IEL(7)
C
C   Ferro
I=1
POTGAM(I)=DGGAM(I)+RCONS*TK*ALOG(APX-APX*XOLD(1))-
0.5*ATGAM(I)*XOL
*D(1)*XOLD(1)-XOLD(1)*(1-XOLD(1))*SAAD1-0.5*((1-
XOLD(1)**2)*SDUPA
POTALF(I)=DGALF(I)+RCONS*TK*ALOG(APX-APX*XOLD(2))-
0.5*ATALF(I)*XOL
*D(2)*XOLD(2)-XOLD(2)*(1-XOLD(2))*SAFD1-0.5*((1-
XOLD(2)**2)*SDUPF
C   Carbono
I=2
SOMATG=0
SOMATA=0
DO 10 J=3,NEL
JJ=IEL(J)
IPOS=(JJ-1)*(JJ-2)/2+(I-1)
SOMATG=SOMATG+ATGAM(IPOS)*PX(J)
10 SOMATA=SOMATA+ATALF(IPOS)*PX(J)
POTGAM(I)=DGGAM(I)+RCONS*TK*ALOG(XOLD(1))+ATGAM(1)*XOLD(1)+(1-
XOLD
*(1))*SOMATG
POTALF(I)=DGALF(I)+RCONS*TK*ALOG(XOLD(2))+ATALF(1)*XOLD(2)+(1-
XOLD
*(2))*SOMATA
C   Demais elementos
I2=1
DO 30 I=3,NEL
II=IEL(I)
SOMATG=0
SOMATA=0
DO 20 J=3,NEL
JJ=IEL(J)
IF(JJ.LT.II) THEN
IP=II
II=JJ
JJ=IP
END IF
IPOS=(JJ-1)*(JJ-2)/2+(II-1)
SOMATG=SOMATG+ATGAM(IPOS)*PX(J)
20 SOMATA=SOMATA+ATALF(IPOS)*PX(J)
C
II=IEL(I)
IPOS=(II-1)*(II-2)/2+I2
POTGAM(I)=DGGAM(II)+RCONS*TK*ALOG(PX(I)*(1-
XOLD(1))+XOLD(1)*ATGAM
*(IPOS)+(1-XOLD(1))*SOMATG
POTALF(I)=DGALF(II)+RCONS*TK*ALOG(PX(I)*(1-
XOLD(2))+XOLD(2)*ATALF
*(IPOS)+(1-XOLD(2))*SOMATA
30 CONTINUE
C
RETURN
END
C

```

```

C      SUBROTINA CALCN
C
C      Esta subrotina define a matriz aumentada AM contendo as
derivadas
C      parciais e as funções avaliadas para os valores correntes das
variá-
C      veis do problema
C
      SUBROUTINE CALCN( IEL )
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /GIBBS/DGGAM(7), DGALF(7), ATGAM(21), ATALF(21), DGCAR(7),
*          PLFE(7), PX(7), APX, SAAD1, SAFD1, SDUPA, SDUPF
      COMMON /COEFAM/XOLD(2), AM(2,3)
      COMMON /VAR1/TK, RCONS, NEL
      COMMON /POT/POTGAM(7), POTALF(7)
      DIMENSION IEL(7)
C      Zera a matriz AM (somente em nxn, pois a coluna n+1 estará
cheia)
      N=2
      DO 10 I=1,N
      DO 10 J=1,N
10     AM(I,J)=0
C
C      Cálculo dos coeficientes não nulos da matriz AM
      AM(1,1)=(RCONS*TK/XOLD(1)+ATGAM(1)-SAAD1)/1000
      AM(1,2)=(-RCONS*TK/XOLD(2)-ATALF(1)+SAFD1)/1000
      CT1D01=1/(XOLD(1)-1)-ATGAM(1)*XOLD(1)-(1-2*XOLD(1))*SAAD1-
(XOLD(1)
      *-1)*SDUPA
      CT1D02=1/(XOLD(2)-1)-ATALF(1)*XOLD(2)-(1-2*XOLD(2))*SAFD1-
(XOLD(2)
      *-1)*SDUPF
      CT1D1=-APX*(POTGAM(1)-POTALF(1))+APX*(1-XOLD(1))*CT1D01
      CT1D2=-APX*(1-XOLD(1))*CT1D02
C
      SDT2G=0
      SDT2A=0
      DO 30 I=3, NEL
      II=IEL(I)
      SDT0G=0
      SDT0A=0
      DO 20 J=3, NEL
      JJ=IEL(J)
      IF(JJ.LT.II) THEN
      IP=II
      II=JJ
      JJ=IP
      END IF
      IPOS=(JJ-1)*(JJ-2)/2+(II-1)
      SDT0G=SDT0G+ATGAM(IPOS)*PX(J)
20     SDT0A=SDT0A+ATALF(IPOS)*PX(J)
      I2=1
      II=IEL(I)
      IPOS=(II-1)*(II-2)/2+I2
      SDT2G=SDT2G-PX(I)*(POTGAM(II)-POTALF(II))+(1-XOLD(1))*PX(I)*(-
RCON
      *S*TK/(1-XOLD(1))+ATGAM(IPOS)-SDT0G)
      SDT2A=SDT2A+(1-XOLD(1))*PX(I)*(RCONS*TK/(1-XOLD(2))-
ATALF(IPOS)+SD

```

```

      *T0A)
30 CONTINUE
C
      AM(2,1)=(CT1D1+SdT2G)/1000
      AM(2,2)=(CT1D2+SdT2A)/1000
C      Valores das funções f1 e f2 - valores negativos em AM(i,3)
      AM(1,3)=(-POTGAM(2)+POTALF(2))/1000
      SPOT=0
      DO 40 M=3,NEL
      MM=IEL(M)
40 SPOT=SPOT+PX(M)*(1-XOLD(1))*(POTGAM(MM)-POTALF(MM))
      AM(2,3)=(-APX*(1-XOLD(1))*(POTGAM(1)-POTALF(1))-SPOT)/1000
C
CCCCC
      WRITE(13,101)
101 FORMAT(4X,'MATRIZ AM',/)
      WRITE(13,102) (AM(1,I),I=1,3)
      WRITE(13,102) (AM(2,I),I=1,3)
102 FORMAT(3(4X,E10.4))
      RETURN
      END
C
C
C      SUBROTINA SOLVLIN
C
C      Quando INDIC é negativo, SIMUL calcula a inversa da matriz A
C      nxn.
C      Quando INDIC é zero, SIMUL calcula a solução X(1)..X(N) corres-
C      pondente ao sistema de equações lineares na matriz aumentada A
C      de
C      n por n+1 e, além disso, calcula a inversa da matriz coeficiente
C      acima. Quando INDIC é positivo, computa a solução do sistema
C      linear,
C      mas a matriz inversa não é computada.
C      Utiliza-se o método de Gauss-Jordan de eliminação completa,
C      com a estratégia de pivot máximo. Os subscritos das linhas e
C      colunas
C      dos pivots sucessivos são armazenados nos arranjos IROW e JCOL,
C      res-
C      pectivamente. K é o contador de pivot, PIVOT é o valor algébrico
C      do
C      elemento pivot, MAX é o número de colunas de A e DETER é o
C      determi-
C      nante da matriz coeficiente. As soluções são computadas na
C      coluna
C      n+1 de A e então colocadas na ordem apropriada no vetor
C      X(1)..X(N),
C      usando as informações dos subscritos dos pivots em IROW e JCOL.
C      O
C      sinal do determinante é ajustado, se necessário, determinando-se
C      se
C      a troca de um número par ou ímpar or par de números é necessária
C      para
C      colocar os elementos do arranjo JORD em sequência ascendente
C      onde
C      JORD(IROW(I))=JCOL(I). Se a inversa é requerida ela é trocada
C      usando
C      Y(1)..Y(N) como armazenamento temporário. O valor do
C      determinante é

```

```

C      retornado como o valor da função. Caso o pivot potencial de
maior
C      magnitude seja menor que EPS, a matriz é considerada singular e
C      um valor nulo é retornado pela função.
C
      SUBROUTINE SOLVLIN(EPS,N,INDIC,SIMUL,DETER,X)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /COEFAM/XOLD(2),AM(2,3)
      DIMENSION IROW(15),JCOL(15),JORD(15),Y(15),X(N)
C
      MAX=N
      IF(INDIC.GE.0) MAX=N+1
C
      Se N maior que 15...
      IF(N.LE.15) GO TO 10
      WRITE(13,200)
      SIMUL=0
      RETURN
C
C      Comece o procedimento de eliminação
10 DETER=1
      DO 80 K=1,N
      KM1=K-1
C
C      .... Procura o elemento PIVOT....
      PIVOT =0
      DO 40 I=1,N
      DO 40 J=1,N
C      ... Varrimento de IROW e JCOL para subscritos de PIVOT inválidos
      IF(K.EQ.1) GO TO 30
      DO 20 ISCAN=1,KM1
      DO 20 JSCAN=1,KM1
      IF(I.EQ.IROW(ISCAN)) GO TO 40
      IF(J.EQ.JCOL(JSCAN)) GO TO 40
20 CONTINUE
30 IF(DABS(AM(I,J)).LE.DABS(PIVOT)) GO TO 40
      PIVOT=AM(I,J)
      IROW(K)=I
      JCOL(K)=J
40 CONTINUE
C
C      ...Assegurando que PIVOT é maior que EPS
      IF(DABS(PIVOT).GT.EPS) GO TO 50
      SIMUL=0
      RETURN
C
C      ...Atualize o valor do determinante
50 IROWK=IROW(K)
      JCOLK=JCOL(K)
      DETER=DETER*PIVOT
C
C      ...Normalização dos elementos PIVOT
      DO 60 J=1,MAX
60 AM(IROWK,J)=AM(IROWK,J)/PIVOT
C
C      ...Fazendo a eliminação e desenvolvendo a inversa
      AM(IROWK,JCOLK)=1/PIVOT
      DO 80 I=1,N
      AIJCK=AM(I,JCOLK)

```

```

      IF(I.EQ.IROWK) GO TO 80
      AM(I,JCOLK)=-AIJCK/PIVOT
      DO 70 J=1,MAX
      IF(J.NE.JCOLK) AM(I,J)=AM(I,J)-AIJCK*AM(IROWK,J)
70  CONTINUE
80  CONTINUE
C
C   . Ordenação dos valores solução,se existir, e criação do arranjo
JORD
      DO 90 I=1,N
      IROWI=IROW(I)
      JCOLI=JCOL(I)
      JORD(IROWI)=JCOLI
      IF(INDIC.GE.0) X(JCOLI)=AM(IROWI,MAX)
90  CONTINUE
C
C   ... Ajuste do sinal do determinante
      INTCH=0
      NM1=N-1
      DO 100 I=1,NM1
      IP1=I+1
      DO 100 J=IP1,N
      IF(JORD(J).GE.JORD(I)) GO TO 100
      JTEMP=JORD(J)
      JORD(J)=JORD(I)
      JORD(I)=JTEMP
      INTCH=INTCH+1
100 CONTINUE
      IF(INTCH/2*2.NE.INTCH) DETER = -DETER
C
C   ...Se INDIC é positivo retorne com os resultados
      IF(INDIC.LE.0) GO TO 110
      SIMUL=DETER
      RETURN
C
C   ...Se INDIC é negativo ou zero ajuste (unscramble) a inversa
c   ...primeiro por linhas
110 DO 130 J=1,N
      DO 120 I=1,N
      IROWI=IROW(I)
      JCOLI=JCOL(I)
120 Y(JCOLI)=AM(IROWI,J)
      DO 130 I=1,N
130 AM(I,J)=Y(I)
C   ... depois por colunas
      DO 150 I=1,N
      DO 140 J=1,N
      IROWJ=IROW(J)
      JCOLJ=JCOL(J)
140 Y(IROWJ)=AM(I,JCOLJ)
      DO 150 J=1,N
150 AM(I,J)=Y(J)
C
C   ..Retorno para INDIC negativo ou zero
      SIMUL=DETER
      RETURN
C
C   ...Formato para declaração de saída
200 FORMAT(5X,'N MUITO GRANDE')
```

```
C
  RETURN
  END
C
C  SUBROTINA PARCEM
C  Cálculo da variação de energia livre dos carbonetos Fe3C,Mn3C,
C  Cr3C,Mo3C e Ni3C e parâmetros de interação LFeM,sendo M válido
C  para Mn,Cr e Ni, (para Si e Mo, LFeM é nulo) na cementita.
C
  SUBROUTINE PARCEM(TK)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
  COMMON /GIBBS/DGGAM(7),DGALF(7),ATGAM(21),ATALF(21),DGCAR(7),
  *      PLFE(7),PX(7),APX,SAAD1,SAFD1,SDUPA,SDUPF
C
  T=TK
  DGCAR(1)=-10745+706.04*T-120.6*T*ALOG(T)
  DGCAR(2)=0
  DGCAR(3)=-82093.28+564.431*T-94.6746*T*ALOG(T)-0.02251534*T*T
  *      +2772081/T-2.643E08/(T*T)+1.2E10/(T**3)
  DGCAR(4)=0
  DGCAR(5)=-73331.27+684.82*T-114.344*T*ALOG(T)+0.00783895*T*T
  *      -4.4316E-06*T*T*T+2980350/T-
  2.643E08/(T*T)+1.2E10/(T**3)
  DGCAR(6)=36392.65+509.089*T-94.99242*T*ALOG(T)-0.0108025*T*T
  *      +1.69885E-06*T*T*T-3.927795E-10*(T**4)+2760037/T
  *      -2.643E08/(T*T)+1.2E10/(T**3)
  DGCAR(7)=1794.08+504.292*T-90.558*T*ALOG(T)-0.0149944*T*T
  *      +2562600/T-2.643E08/(T*T)+1.2E10/(T**3)
C
  PLFE(1)=0
  PLFE(2)=0
  PLFE(3)=10434-14.281*T
  PLFE(4)=0
  PLFE(5)=20976-20.314*T
  PLFE(6)=0
  PLFE(7)=29400
C
  RETURN
  END
```

17.3. Rotina de Obtenção dos Parâmetros A e B de Ajuste do Modelo

```

C
*****
C   Rotina para cálculo das constantes A e B do coeficiente b da
equação
C   de Avrami, e aplicando-se a regra da aditividade, através de um
algo-
C   ritmo de minimização dos resíduos quadrados.
C   Dimensionamento de arranjos e leitura de dados
C
*****
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /BLOCV/XA(410,8),XAVR(410,6),VETA(6),VETB(6)
      COMMON /BLOCC/AE3,A,B,HA,HB,XNAV,NPON,ION
      DIMENSION VAR(2,6),XAVRM(410,6)
C   Leitura de dados
      OPEN(11, FILE = 'EntXA_Avr.TXT', STATUS= 'OLD')
      READ(11,*) NENSAI,AE3
C   Intervalo para o grid de A e B
      READ(11,*) AMIN,AMAX,BMIN,BMAX,HA,HB
C   ION: forma do valor de n na equação de Avrami: ion =1 > n é
constante
      READ(11,*) ION
      IF(ION.EQ.1) READ(11,*) XNAV
C   Zera a parte dos vetores de fração transformada que não
preencherão toda
C   a coluna (para as frações de ferrita)
      READ(11,*) NPON,JM
      DO 10 I=1,NPON
      DO 10 J=5,8
10  XA(I,J)=0
C   Leitura dos pontos de transformação
      DO 20 I=1,NPON
20  READ(11,*) (XA(I,J),J=1,JM)
C
C   Arquivo de saída e impressão de dados de entrada
      OPEN(12, FILE = 'R_XA_AV.DAT', STATUS= 'UNKNOWN')
      WRITE(12,210) NENSAI
210  FORMAT(/,5X,'ENSAIO: ',I3)
C
C   AE3=XA(1,2)
C   Número de pontos do grid
      NA=INT((AMAX-AMIN)/HA)+1
      NB=INT((BMAX-BMIN)/HB)+1
C   Início dos cálculos
      J=2
30  J=J+1
      JA=J-2
      SR2M=1.E10
C   Início do loop sobre o grid
      A=AMIN-HA
      DO 50 IGRID=1,NA
      A=A+HA
      B=BMIN-HB
      DO 50 JGRID=1,NB
      B=B+HB
      CALL QUAD(SR2,J)
C

```

```

C      Verifica se SR2 é menor que o valor anterior
      IF(SR2.LE.SR2M) THEN
      SR2M=SR2
      AO=A
      BO=B
      DO 40 IPON=1,NPON
40     XAVRM(IPON,JA)=XAVR(IPON,JA)
      END IF
50     CONTINUE

C
60     VAR(1,JA)=SR2M/(NPON-3)
      VAR(2,JA)=SR2M
      VETA(JA)=AO
      VETB(JA)=BO

C      Cálculos para outra coluna de fração transformada
      IF(J.LT.JM) GO TO 30

C
C      Impressão dos resultados
      WRITE(12,300) (VETA(JA),JA=1,JM-2)
      WRITE(12,310) (VETB(JA),JA=1,JM-2)
      WRITE(12,320) (VAR(1,JA),JA=1,JM-2)
      WRITE(12,330) (VAR(2,JA),JA=1,JM-2)
      WRITE(12,340)
      DO 100 I=1,NPON
100    WRITE(12,350) XA(I,2),(XAVRM(I,JA),JA=1,JM-2)
300    FORMAT(2X,'VETOR A ',6(2X,F8.4))
310    FORMAT(2X,'VETOR B ',6(2X,F8.4))
320    FORMAT(2X,'VARIÂNCIA ',6(2X,E11.4))
330    FORMAT(2X,'SR2 ',6(2X,E11.4))
340    FORMAT(2X,'T(°C)',4X,'XA_RA',4X,'XA_KM',2X,'XFT_RA',2X,'XFT-
KM',2X
      *,'XFN_RA',2X,'XFN_KM')
350    FORMAT(2X,F5.1,6(2X,F7.4))
      END

C
C      SUBROTINA QUAD
C      Cálculo de XA por Avrami/Aditividade e soma dos resíduos
quadrados
C
      SUBROUTINE QUAD(SR2,J)
      IMPLICIT DOUBLE PRECISION(A-H,O-Z)
      COMMON /BLOCV/XA(410,8),XAVR(410,6),VETA(6),VETB(6)
      COMMON /BLOCC/AE3,A,B,HA,HB,XNAV,NPON,ION

C
C      Valores de inicialização e cálculo da fração transformada na
C      primeira temperatura abaixo de AE3
      JA=J-2
      IF(ION.EQ.1) THEN
      XN=XNAV
      ELSE
      XN=1-0.5*XAVR(2,JA)*XAVR(2,JA)
      END IF
      BCOEF=EXP(A*(AE3-XA(2,2))+B)
      DT=XA(2,1)-XA(1,1)
      XAVR(2,JA)=1-EXP(-BCOEF*(DT**XN))
      DIF=XA(2,J)-XAVR(2,JA)
      SR2=DIF*DIF

C      Cálculo dos demais pontos
      DO 10 I=3,NPON

```

```
IF(XA(I,J).EQ.0) GO TO 10
IF(ION.NE.1) XN=1-0.5*XAVR(I-1,JA)*XAVR(I-1,JA)
C   Tempo virtual
C
BCOEF=EXP(A*(AE3-XA(I,2))+B)
DEN=1-XAVR(I-1,JA)
IF(DEN.LE.0) GO TO 20
TV=(ALOG(1/DEN)/BCOEF)**(1/XN)
C   Parâmetro b e XA_Avrami
DT=XA(I,1)-XA(I-1,1)
XAVR(I,JA)=1-EXP(-BCOEF*((TV+DT)**XN))
C   Somatório do resíduo quadrado
DIF=XA(I,J)-XAVR(I,JA)
SR2=SR2+DIF*DIF
C
10 CONTINUE
20 CONTINUE
RETURN
END
```