ELEIR MUNDIM BORTOLETO

**MODELAMENTO NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DAS
TRANSFORMAÇÕES DE FASE NOS TRATAMENTOS TÉRMICOS DE
AÇOS**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Mestre em Engenharia

SÃO PAULO

2010

ELEIR MUNDIM BORTOLETO

MODELAMENTO NUMÉRICO-COMPUTACIONAL DAS
TRANSFORMAÇÕES DE FASE NOS TRATAMENTOS TÉRMICOS DE
AÇOS

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São
Paulo para obtenção do título de
Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Engenharia
Mecânica de Projeto de Fabricação

Orientador: Prof. Dr. Roberto Martins
de Souza

SÃO PAULO

2010

Este exemplar foi revisado e alterado em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, de agosto de 2010.

Assinatura do autor Eleir Mundim Bortoleto

Assinatura do orientador Rio H de L

FICHA CATALOGRÁFICA

Bortoleto, Eleir Mundim

Modelamento numérico-computacional das transformações de fase nos tratamentos térmicos de aços / E.M. Bortoleto. -- ed.rev. -- São Paulo, 2010. 114 p.

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1. Tratamento térmico 2. Transformações de fase dos aços 3. Problema termo-mecânico-metalúrgico acoplado 4. Método dos elementos finitos 5. Tensão residual I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II. t.

DEDICATÓRIA

Às pessoas que sempre me acompanharam, em todos os momentos da minha vida, que me ensinaram valores, ética e perseverança, que sempre se empenharam em me oferecer o melhor, carinho, atenção, alegria, oportunidade de educação, e que foram o maior exemplo de vida e de como se viver. A meu pai Roberto, minha mãe Izilda e minhas irmãs Eveliny e Elaine.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao Prof. Dr. Roberto Martins de Souza pela orientação, desde os tempos de iniciação científica, pela atenção, dedicação e confiança que depositou em mim, pelos ensinamentos e pela amizade. Quero exprimir minha completa admiração e meu reconhecimento pelo extraordinário apoio científico, disponibilidade e constante incentivo que manifestou durante a preparação deste trabalho e agradecer pelas metáforas futebolísticas inspiradoras e pelas lições de como construir arcabouços robustos para a vida.

Agradeço ao Prof. Dr. Amilton Sinatora pelo seu interesse neste trabalho, pelas idéias trocadas na resolução de questões que se levantaram e pelas visões de mundo que compartilha e que sempre contribuem para a compreensão da Ciência e da Engenharia sob enfoques não convencionais, filosóficos, sociais, históricos, humanos.

Agradeço à Prof^a. Dr. Izabel Fernanda Machado o interesse que sempre manifestou durante a realização deste trabalho, a disponibilidade e auxílio que ofereceu na sugestão de alternativas e concepções para os experimentos e nas conversas, sempre esclarecedoras, que me permitiram compreender melhor os fenômenos mecânico-metalúrgicos.

Agradeço igualmente a todos os demais docentes do Laboratório de Fenômenos de Superfície: Prof. Dr. Deniol Tanaka, Prof. Dr. André Tschiptschin, Prof. Dr. Mário Boccallini, pelas contribuições desde os tempos de IC.

Ao Prof. Dr. Gustavo Donato que foi bastante prestativo e atencioso ao me receber no Centro Universitário FEI e que propiciou a realização dos ensaios experimentais, disponibilizando o laboratório e equipamento para que este trabalho fosse realizado.

Aos professores Dr. Helio Goldenstein, Dr. Marcio Gustavo Di V. Cuppari e Dra Lauralice Canalle pela contribuição que deram a esse trabalho por suas participações nas bancas de qualificação e defesa.

Agradeço aos técnicos do LFS, Leandro de Paula, pela ajuda com os ensaios de têmpera, metalografia e medições; Francisco Faustino, pela usinagem dos corpos de prova; e Raquel Camponucci, pela ajuda na seleção dos sensores de temperatura. Aos três, que sempre me auxiliaram nas atividades do trabalho, pela

constante disponibilidade e apoio na utilização do laboratório metalográfico, pela cooperação e amizade.

Às Dras Maria Cristina Farias e Adriana Gomes, pelas sugestões e explicações técnicas ao longo do trabalho.

À Silene e Sidney Carneiro, pela constante prontidão e disponibilidade em ajudar em tudo.

Aos amigos do LFS Marco Aurélio, Alexandre Martins, Cristiano Lagatta, Mario Vitor, Felipe Carneiro, John Ferney, John Jairo, Cristian Viafara, enfim, toda família do Laboratório de Fenômenos da Superfície, pelas sugestões, companhia e interesse nas discussões e ótimos momentos de descontração e pelo ótimo e prazeroso ambiente de trabalho que proporcionaram e que muito contribuiu para a realização deste trabalho.

À empresa Aços Villares SA, pelo investimento financeiro nas primeiras etapas desse trabalho e às pessoas que de lá incentivaram e demonstraram interesse nos frutos dessa pesquisa: Claudia Serantoni, Jovânio Oliveira, Claudio Santos, Marcio Matos e Felipe Bernardes.

Aos amigos Pedro Neves e Meire de Almeida, pelo apoio em tudo e pela companhia sempre agradável e motivadora.

À Paulinha, com seu constante apoio e incentivo, que ouviu com interesse meus problemas, preocupou-se e entendeu minhas ausências e em todo o tempo me faz muito feliz.

Às minhas irmãs Elaine e Eveliny, pela sempre pronta vontade em ajudar e disposição em mover mundos para me fazerem o bem, pelos ensinamentos ao irmão mais novo, pelo apoio incondicional e pela companhia.

Aos meus pais, que sempre me apoiaram e incentivaram, fundamentais em toda a minha vida e que formaram a família à qual fazer parte me deixa muito feliz e honrado, que proporcionaram minha formação como pessoa e profissional, me poupando das dificuldades que eles já superaram.

RESUMO

Neste trabalho, propõe-se um modelo numérico-computacional representativo dos processos de tratamento térmico, que seja uma ferramenta eficiente e forneça meios para um entendimento efetivo do mecanismo de geração de tensões residuais durante a têmpera de aços. Foram investigados os fenômenos térmicos, mecânicos e de transformação de fase observados na têmpera, bem como o acoplamento entre esses três fenômenos. O modelo utiliza o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o programa ABAQUS®, além de rotinas numéricas em FORTRAN responsáveis pela resolução do problema termo-mecânico-microestrutural acoplado. A utilização de sub-rotinas, que implementam uma alteração na formulação (matemática e numérica) do programa de Elementos Finitos, permite incluir no modelo as informações presentes em uma curva CRC (curva de resfriamento contínuo) do aço SAE 4140, implementando o cálculo de deformações da peça simulada de modo incremental e cumulativo. Os resultados mostram que a utilização das sub-rotinas desenvolvidas neste trabalho permitiu implementar, conjuntamente com o programa ABAQUS®, o cálculo das frações volumétricas, durezas, distorções e tensões que surgem em um tratamento térmico de têmpera, simulando as transformações martensítica, perlítica, bainítica e ferrítica. Os resultados dos modelos foram equivalentes aos relatados pela literatura, principalmente no que se refere às durezas e tensões associadas a cada transformação de fase. Em particular, os resultados indicam que a transformação martensítica está sempre associada à formação de tensões compressivas. Ensaios experimentais foram realizados a fim de validar os modelos computacionais propostos, utilizando-se um teste Jominy adaptado e instrumentado, de modo a permitir a amostragem da variação de temperaturas no material. Ensaios metalográficos permitiram correlacionar as frações volumétricas transformadas durante a têmpera do corpo de prova Jominy aos valores calculados pelo modelo numérico acoplado.

Palavras-chave: Tratamentos térmicos. Transformações de fase dos aços. Problema acoplado. Elementos Finitos. Sub-rotinas FORTRAN. Diagramas de Transformação. Tensão Residual

ABSTRACT

The objective of this work is to analyze residual strains and stresses and volumetric expansion due to phase transformations that occur during quenching of a steel body, as well as to predict these phase transformations. The coupled thermo-mechanical-phase transformation problem was analyzed, specifically in terms of the quenching process. Different computational models were presented, based on the finite element software ABAQUS® and on the use of FORTRAN subroutines. The continuous-cooling-transformation (CCT) diagrams of SAE 4140 steel are represented differently in each model, depending on the transformed phases and correspondent volumetric expansion. These subroutines include information from the CCT diagrams of SAE 4140 into a FORTRAN code. The subroutine calculates all the microstructures resulting from quenching (ferrite, pearlite, bainite, and martensite), depending on cooling rate. The numerical analysis conducted in this work provided results in terms of the temperature and stresses developed during quenching. The properties determined in this work are hardness, yield strength, volumetric fraction and distortion. Hardness has been predicted by the use of analytical equations. The finite element analyses were able to explain and reproduce phenomena observed during quenching of a steel cylinder. In particular, numerical results indicated that martensite formation is always related to a compressive stress field. The results of the models are in qualitative agreement with data provided by literature, particularly, in relation to the stresses originated by each different phase transformation during quenching process. Experimental testing was conducted, based on the analysis of the quenching of a Jominy probe, in order to validate the computational model developed in this work.

KEYWORDS: Heat Treatment. Phase transformation. Coupling Thermo-Mechanical. FEM. TTT and CCT diagrams. FORTRAN subroutines. Residual stress

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Estrutura cristalina cúbica de face centrada (CFC) (CALLISTER, 2002).	7
Figura 2 – Estrutura cristalina cúbica de corpo centrada (CCC) (CALLISTER, 2002).	7
Figura 3 – Curvas de resfriamento sobrepostas à curva TTT de um aço genérico, indicando as transformações de fase em cada região do material. Curva em vermelho pode se referir à superfície de um cilindro e curva amarela ao centro do mesmo cilindro. Adaptado de American Society for Metals (1990).	9
Figura 4 – Curvas de resfriamento, com taxa de resfriamento menor, sobrepostas à curva TTT de um aço genérico, indicando as transformações de fase em cada região do material. Curva em vermelho pode se referir à superfície de um cilindro e curva amarela ao centro do mesmo cilindro. Adaptado de American Society for Metals (1990).	10
Figura 5 – Diagrama de fase Fe-C, indicando as transformações de fase que ocorrem em condições de equilíbrio. Adaptado de Pollack (1988).....	11
Figura 6 – Diagrama TTT genérico de um aço, indicando as transformações de fase que ocorrem fora do equilíbrio. Adaptado de Chiaverini (1986).	13
Figura 7 – Trajetórias arbitrárias temperatura-tempo sobre o diagrama de transformação isotérmica. Adaptado de Reed-Hill (1982).	14
Figura 8 – Comparação do diagrama de resfriamento contínuo com o diagrama isotérmico para um aço eutetóide. Adaptado de Reed-Hill (1982).	15
Figura 9 – Produtos da têmpera oriundos da transformação da austenita. ..	17
Figura 10 – Transformação martensítica, com evolução da estrutura CFC para a estrutura TCC. Adaptado de Callister (2000) e Reed-Hill (1982).	18
Figura 11 – Diagrama das relações entre os problemas acoplados na transformação de fase de aços. Adaptado de Inoue (2004).	20
Figura 12 – Definição do coeficiente de expansão térmica	22
Figura 13 – Transformação de fase devida à variação de temperatura. Adaptado de Teixeira (2002).	24
Figura 14 – Equação de Avrami na forma de gráfico, representando os períodos de nucleação de crescimento da fase modelada.	32

Figura 15 – Diagrama TTT esquemático e curva de resfriamento simplificada em isotermas para facilitar o cálculo do crescimento das fases.....	40
Figura 16 – Comportamento da tensão residual ao longo do diâmetro do cilindro, segundo o estudo de Ebert ¹⁹ , sem considerar a transformação de fase do material, ou seja, tensões exclusivamente térmicas.	45
Figura 17 – Comportamento da tensão residual ao longo do diâmetro do cilindro, segundo o estudo de Ebert (1978), considerando apenas o efeito da transformação de fase do material (desconsideram-se tensões térmicas).	46
Figura 18 – Distribuição de tensão residual em geometria cilíndrica. Adaptado de: Inoue e Tanaka (1975).....	47
Figura 19 – Acoplamento entre fenômenos considerado pela Proposta 1 ...	55
Figura 20 – Diagrama de resfriamento contínuo do aço SAE 4140 utilizado para a construção do modelo MEF e das sub-rotinas FORTRAN. Adaptado de ASM (1977).....	57
Figura 21 – Diagramas de transformação de fase simplificados para cada um dos modelos desenvolvidos pelas sub-rotinas em FORTRAN.....	58
Figura 22 – Malha de Elementos Finitos utilizada representando metade da seção axial do cilindro (à esquerda) e variação da temperatura na superfície do cilindro (à direita).....	59
Figura 23 – Diagrama do acoplamento termo-mecânico-microestrutural e as interações com as relações entre cada fenômeno. Adaptado de Inoue, (2004).....	61
Figura 24 – Diagrama 3D para a definição da condutividade térmica em função do tempo e da temperatura detalhando região de têmpera utilizado por Risso et al. (2004)	62
Figura 25 – Valores do módulo de elasticidade em função da temperatura utilizados no modelamento computacional. Adaptado de ASME B31.1,1995.	63
Figura 26 – Modelo com maior detalhamento do comportamento das curvas TTT e CRC do material	64
Figura 27 – Detalhe do Método de interpolação utilizado para o cálculo das frações volumétricas	65
Figura 28 – Fluxograma com as inter-relações entre os blocos de sub-rotinas desenvolvidas e o programa Abaqus®.....	66

Figura 29 – Malha de elementos finitos representativa da geometria de uma proveta Jominy (esquerda) e as dimensões do corpo de prova segundo a Norma ASTM A255 (direita).....	67
Figura 30 – Malhas axissimétricas utilizadas no modelamento, mais e menos refinadas, e extrapolação tridimensional que pode ser feita com os resultados obtidos.....	69
Figura 31 – Condições de contorno térmicas (variações de temperaturas) impostas aos modelos.....	70
Figura 32 – Condições de Contorno impostas ao modelo. (A) Mecânicas, (B) Térmicas.....	70
Figura 33 – Ilustração do Aparato para o Ensaio de Temperabilidade Jominy. Adaptada de Chiaverini (1986).....	71
Figura 34 – Dimensões do corpo de prova cilíndrico para o ensaio Jominy. Fonte: ASTM A255 (1999)	72
Figura 35 – Aparato para realização de série de ensaios Jominy instrumentados.....	74
Figura 36 – Pontos de Amostragem idealizados para o ensaio com vazão 215 ml/s.....	75
Figura 37 – Novos Pontos de Amostragem para o ensaio com vazão 150 ml/s.....	76
Figura 38 – (A) Amostra em estado imediatamente após o término do tratamento térmico. (B) Trilhas longitudinais usinadas para medição de dureza superficial.	77
Figura 39 – Sobreposição entre as curvas de resfriamento calculadas e os diagramas de transformação de fase simplificados. Direção das setas indica as curvas de resfriamento da superfície para o centro do cilindro.	80
Figura 40 – Distribuição de tensões radiais calculadas para o cilindro de aço SAE 4140 ($\Phi=4,5$ cm e $L=18$ cm)	81
Figura 41 – Distribuição das tensões axiais calculadas para o cilindro de aço SAE 4140 ($\Phi=4,5$ cm e $L=18$ cm)	82
Figura 42 – Resultados de tensões calculadas ao longo do raio do cilindro na posição central em relação ao seu comprimento, ao fim da têmpera	83
Figura 43 – Resultado experimental da variação da temperatura durante tratamento térmico com jato de água a vazão de 215 ml/s	84

Figura 44 – Resultado experimental da variação da temperatura durante tratamento térmico com jato de água a vazão de 150 ml/s	85
Figura 45 – Comparação entre o comportamento térmico simulado e o real para o caso da refrigeração mais severa	85
Figura 46 – Comparação entre o comportamento térmico simulado e o real para o ensaio com resfriamento moderado.....	86
Figura 47 – Comparativo entre a alteração dimensional simulada e a medida após o tratamento térmico de têmpera com resfriamento rápido	88
Figura 48 – Comparativo entre a alteração dimensional simulada e a medida após o tratamento térmico de têmpera com resfriamento moderado.....	88
Figura 49 – Alterações dimensionais em proveta Jominy de aço SAE 4140. Fonte: Ramanathan e Foley (2001).....	89
Figura 50 – Resultado numérico da evolução das frações volumétricas na face inferior da proveta Jominy durante a têmpera do material.....	90
Figura 51 – Resultado numérico da evolução das frações volumétricas na metade do corpo de prova Jominy durante a têmpera do material	91
Figura 52 – Resultado numérico da evolução das frações volumétricas na posição equivalente a 1/10 da altura da proveta Jominy durante a têmpera do material	91
Figura 53 – Alteração microestrutural em função da distância em relação à face resfriada. Proveta submetida a resfriamento rápido.	92
Figura 54 – Porcentagem de martensita formada ao final do processo de têmpera da proveta Jominy	95
Figura 55 – Distribuição das fases ao final do tratamento térmico de têmpera com resfriamento rápido.....	96
Figura 56 – Comparação entre valores de dureza Vickers (resfriamento severo)	97
Figura 57 – Comparação entre valores de dureza Vickers (resfriamento moderado)	97
Figura 58 – Variação da Dureza Vickers ao longo do raio para 3 posições da altura da proveta Jominy. Comparação entre valores calculados pelo modelo numérico e medidos experimentalmente.....	98
Figura 59 – Tensões residuais ao longo do raio para a seção transversal equivalente à face inferior do corpo de prova (h=0 mm)	99

Figura 60 – Tensões residuais ao longo do raio para a seção transversal equivalente à metade da altura do corpo de prova ($h=50$ mm)	100
Figura 61 – Evolução das tensões ao longo da têmpera no corpo de prova Jominy.....	101

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Variação das entalpias de transformação para os diferentes produtos da decomposição da austenita. (Fonte: Lee e Lee, 2008).....	25
Tabela 2 – Expressões gerais da variação volumétrica em cada transformação de fase em função do teor de carbono da liga e valores calculados para o aço SAE 4140. Adaptado de Totten e Howes (1997).....	27
Tabela 3 – Propriedades de cada microconstituente formado a partir da austenita. Adaptado de Bhadeshia (2002).	30
Tabela 4 – Outras propriedades do aço SAE4140	56
Tabela 5 – Composição química nominal do aço SAE 4140. Adaptada de Atkins (1980).	56
Tabela 6 – Expressões para a expansão volumétrica de cada transformação em função da porcentagem de carbono e valores para o aço SAE 4140. Adapt. de Gozzi (2005) e Totten e Howes (1997).....	57
Tabela 7 – Comparativo entre tempos de processamento	68
Tabela 8 – Sequência e aproveitamento dos ensaios realizados.....	77
Tabela 9 – Comparação entre os valores das frações volumétricas formadas ao final dos ensaios Jominy com resfriamento rápido, medidas experimentalmente e calculadas numericamente.....	93
Tabela 10 – Comparação entre os valores das frações volumétricas formadas ao final dos ensaios Jominy com resfriamento moderado, medidas experimentalmente e calculadas numericamente.	94

LISTA DE SÍMBOLOS

A_f	Temperatura de fim da formação de austenita
A_s	Temperatura de início da formação de austenita
c_p	Calor específico
E	Módulo de elasticidade ou módulo de Young
E_A	Módulo de Elasticidade da austenita
E_M	Módulo de Elasticidade da martensita
F_b	Variáveis de dependência
h	Coeficiente de convecção
H	Entalpia
H_i^γ	Entalpia da austenita
H_i^π	Entalpia da fase π
H_v	Dureza Vickers
L	Altura (ou comprimento) do corpo de prova Jominy
M_f	Temperatura de fim da transformação martensítica
M_s	Temperatura de início da transformação martensítica
P	Módulo de plasticidade
q	Fluxo de calor
T	Temperatura
T_s	Temperatura da superfície
T_q	Temperatura do ambiente
t	Tempo
V_M	Fração volumétrica de martensita
V_γ	Fração volumétrica de austenita
V_π	Fração volumétrica da fase π
X_π	Fração volumétrica da fase π
α	Ferrita alfa
α'	Martensita
α_b	Bainita
α_T	Coeficiente de expansão térmica
α_T'	Derivada do coef. de expansão térmica

β	Fração volumétrica de martensita
γ	Austenita
δ	Ferrita delta
p	Perlita
θ	Temperatura
θ_i	Temperatura inicial
θ_0	Temperatura de referência
$d\theta$	Incremento de temperatura
$d\epsilon_{th}$	Incremento de deformação térmica
ϵ	Deformação
ϵ_{th}	Deformação térmica
σ	Tensão
σ_{th}	Tensão térmica
σ_y	Tensão de escoamento do material
π	Qualquer fase entre perlita, bainita, ferrita e martensita
ΔH	Variação de Entalpia (calor latente)
ρ	Densidade
λ	Condutividade térmica
ν	Coeficiente de Poisson

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	5
2.1 Aços	5
2.1.1 Estrutura Cristalina dos Aços	6
2.2 Tratamentos Térmicos dos aços	8
2.2.1 Têmpera	8
2.3 Diagramas de Transformação de Fase.....	11
2.3.1 Curvas de Transformação Isotérmica - TI	13
2.3.2 Curvas de Resfriamento Contínuo - CRC.....	15
2.4 Transformações de Fase em Aços	16
2.5 O Problema Termo-Mecânico-Microestrutural Acoplado	20
2.5.1 Efeito da temperatura na geração de tensões e deformações	21
2.5.2 Efeito das tensões e deformações na variação da temperatura...	23
2.5.3 Efeito da Temperatura na alteração da microestrutura	24
2.5.4 Efeito da microestrutura na variação de temperatura.....	25
2.5.5 Efeito da microestrutura na geração de tensões e deformações..	26
2.5.6 Efeito de tensões e deformações na alteração da microestrutura	27
2.5.7 Propriedades físicas em função da temperatura e da microestrutura	28
2.6 Modelos Matemáticos	30
2.6.1 Transformações Difusionais - O modelo JMAK	31
2.6.2 Transformações Adifusionais - A Equação empírica de Koistiner e Marburger.....	32
2.7 Modelos Numérico-Computacionais, Aplicações e Implementações ..	33
2.7.1 Equações acopladas Vs. Equações desacopladas	34
2.7.2 Abordagem estritamente Térmica	36

2.7.3 Abordagem Termo-mecânica	36
2.7.4 Abordagem Termo-mecânico-metalúrgica.....	37
2.7.5 Cálculo das frações volumétricas transformadas	38
2.7.6 Cálculo e Predição de Curvas de Transformação	41
2.8 Modelos para estimativa de Dureza Vickers	41
2.9 Tensão Residual	43
2.10 Método dos Elementos Finitos (MEF)	48
3. OBJETIVOS.....	49
4. MATERIAIS E MÉTODOS.....	51
4.1 Modelamento Computacional Por Elementos Finitos.....	51
4.1.1 Implementação de algoritmos e sub-rotinas de usuário no programa Abaqus.....	52
4.1.2 Primeira Abordagem (Proposta 1)	54
4.1.2.1 Materiais	55
4.1.2.2 Métodos	58
4.1.3 Segunda Abordagem (Proposta 2)	60
4.1.3.1 Materiais	61
4.1.3.2 Métodos	64
4.1.4 Limitações do Modelamento.....	71
4.2 Ensaio em Laboratório	71
4.2.1 Ensaio Jominy e Metalografia Quantitativa.....	71
4.2.2 Validação Experimental	73
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	79
5.1 Resultados da Proposta 1	79
5.2 Resultados da Proposta 2.....	84
5.2.1 Temperaturas	84
5.2.2 Distorções e Alterações Dimensionais	87

5.2.3 Frações Volumétricas dos Microconstituintes.....	89
5.2.4 Dureza Vickers	97
5.2.5 Tensão Residual.....	99
6. CONCLUSÕES.....	103
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	105
ANEXO A – Desenho de fabricação do corpo de prova Jominy adaptado para instrumentação por termopares	113

INTRODUÇÃO

O desenvolvimento tecnológico aliado ao progresso técnico e às crescentes exigências por maiores índices de produtividade, menores tempos dos processos de produção e fabricação e maior eficiência no uso de matérias primas, máquinas e mão de obra exigem, cada vez mais, materiais e sistemas mecânicos com maior resistência ao desgaste. Esses materiais e sistemas devem igualmente apresentar propriedades mecânicas que garantam melhores desempenhos durante o uso e uma vida útil maior, com riscos de falhas reduzidos. Para satisfazer a essas demandas, os aços têm papel fundamental e os processos de tratamento térmico de aços têm relevância crítica, principalmente no que se refere à obtenção de melhores propriedades mecânicas e no melhor comportamento do material durante sua utilização (PACHECO et al., 2007; OLIVEIRA et al. 2001).

É durante os tratamentos térmicos, e através destes, que são obtidos os arranjos microestruturais desejados para a morfologia dos aços, de forma que, dependendo das combinações e disposições de fases e demais microconstituintes, são conferidas essas ou aquelas propriedades mecânicas ao material, além de determinados comportamentos característicos desejados. A obtenção de tais microconstituintes é, quase sempre, associada a expansões volumétricas do material que, por sua vez, induzem tensões residuais térmicas e de transformação de fase (EBERT, 1978; BORTOLETO et al., 2008). O controle dos níveis dessas tensões residuais é importante para se evitar quebras, trincas, distorções, descartes e retrabalhos das peças tratadas termicamente. Isso torna os processos de tratamento térmico, e outros processos associados a estes, críticos na fabricação de aços de elevada resistência (HARDIN e BECKERMANN, 2005).

A questão energética é outro ponto relevante, visto que o aquecimento e reaquecimento de milhares de toneladas de material metálico geram um elevado consumo de energia, de forma que a otimização dos processos de tratamento térmico pode resultar em uma redução significativa no consumo energético desse processo de fabricação. De fato, Hardin e Beckermann (2005) assinalam uma economia superior a 1,51 trilhões de kJ/ano (equivalente a aproximadamente US\$ 7milhões), caso ações sejam tomadas para a otimização de tratamentos térmicos em fundições norte americanas. Por se tratar de uma estimativa conservadora, ainda que referente a outro país, este valor pode servir como referência para análises

semelhantes com relação aos processos produtivos da indústria siderúrgica nacional e indústrias de fundições em geral.

A realização de tais pretensões e a garantia de se obter materiais de elevada resistência com mínimas possibilidades de falha fazem necessárias predições corretas da composição entre fases microconstituintes do aço e das tensões residuais geradas no processo de tratamento térmico. Há diversos modelos matemáticos desenvolvidos para tal fim, começando pelos clássicos modelos de Avrami (AVRAMI, 1939), Kolmogorov (KOLMOGOROV, 1937, 1939) e Johnson–Mehl (JOHNSON E MEHL, 1939), desenvolvidos na década de 1930 e que foram constantemente revisados, derivados, ampliados, combinados e generalizados pela contribuição de vários pesquisadores (CAHN, 1996; BERRAHMOUNE, 2006; PEULTIER et al., 2004), resultando em várias abordagens do modelo hoje conhecido como Kolmogorov–Johnson–Mehl–Avrami (KJMA), que descreve a cinética das transformações de fase no estado sólido. Já uma relação empírica bastante difundida e aplicável em estudos da transformação martensítica é a equação de Koistinen-Marburger (KOISTINEN e MARBURGER, 1959), que, assim como o modelo JMAK, foi implementada computacionalmente através de vários softwares, acadêmicos ou comerciais, de diferentes formas. Entretanto, o uso dessas ferramentas computacionais está restrito aos seus desenvolvedores acadêmicos, ou ainda carecem de validação experimental ou, quando abertas ou disponibilizadas comercialmente, tem seu uso limitado à resolução de problemas simples que não podem ser extrapolados ou generalizados para os processos reais (HARDIN e BECKERMANN, 2005). A diversidade de modelos e implementações ainda não forneceu nenhuma ferramenta amplamente aceita e utilizada pela comunidade científica e tecnológica no que se refere à predição de microestruturas e tensões residuais nos tratamentos térmicos de aços (HARDIN e BECKERMANN, 2005).

O desenvolvimento de um modelo matemático e computacional que seja robusto e amplo exige a resolução de um problema termo-mecânico-microestrutural acoplado (INOUE, 2004), que considere o fato de que todas as variáveis interferem mutuamente, em maior ou menor grau, dependendo do fenômeno físico envolvido. Ou seja, cada problema tem relação com os outros dois, numa tripla interação. Tais interações podem ser desacopladas matematicamente, gerando modelos simplificados e independentes, como mostram os trabalhos de Pacheco et al.

(2001a, 2001b, 2004, 2005, 2007), Risso et al. (2004) e Leblond et al. (1984, 1986, 1989). Outros pesquisadores incluem em seus modelos todas as interações relevantes, admitindo simplificações e aproximações em algumas delas de forma a permitir sua implementação computacional, como Sarmiento (2002, 2004) e Hardin e Beckermann (2005).

Uma avaliação qualitativa do comportamento das tensões residuais geradas por tratamentos térmicos pode ser realizada segundo as disposições de Ebert (1978), pelas quais se podem esperar, em um tratamento térmico de têmpera típico, tensões de compressão na superfície do material e de tração nas partes mais internas, devido à transformação martensítica que ocorre nesse tipo de tratamento. Outras fases além da martensita podem se formar da decomposição da austenita, sendo que cada uma dessas transformações é acompanhada por uma expansão ou contração volumétrica devido ao rearranjo microestrutural no material, aumentando ou aliviando as tensões residuais presentes na estrutura (SHI et al., 2004; BORTOLETO et al., 2008]. Somado a isso, há liberação de energia durante essas reações e alteração das propriedades mecânicas do material (INOUE, 2004). Todas estas interações estão, ainda, sobrepostas ao problema de condução de calor no material.

No intuito de preparar condições e tecer relações para o desenvolvimento de um novo modelo numérico computacional para a simulação, cálculo e resolução de problemas de transformação de fase em tratamentos térmicos de peças de aço, este trabalho apresenta uma breve revisão bibliográfica na qual trata sobre os aços, suas estruturas cristalinas e a relação destas com tratamentos térmicos, curvas de transformação de fase e propriedades em função das fases transformadas. Parte-se, pois, para a análise de alguns modelos clássicos e formulações propostas pela literatura em estudos sobre tratamentos térmicos, em especial do processo de têmpera. Em particular, atenta-se para aqueles modelos que permitem o cálculo e predição de variáveis de interesse, como as tensões térmicas e de transformação de fase e as frações de cada fase na microestrutura do aço após tratamento, comparando-os e descrevendo vantagens e desvantagens de cada um.

Propõe-se, então, o desenvolvimento de um novo modelo para análise do problema termo-mecânico-microestrutural no tratamento térmico de têmpera em aços, utilizando-se o software de elementos finitos Abaqus para os cálculos térmicos e mecânicos, além de rotinas escritas em linguagem FORTRAN que implementam

os cálculos do modelo de transformação de fase, expansão volumétrica, geração de calor, alteração de propriedades mecânicas e outros fenômenos metalúrgicos, além da predição de dureza. Tal implementação se dá pela discretização de curvas de transformação de fase para resfriamento contínuo (CRC) de um aço SAE 4140, de forma a permitir a interpolação entre essas curvas e as curvas de resfriamento do material tratado termicamente. Propõe-se, também, a validação experimental do modelo numérico computacional apresentado, através de uma série de ensaios Jominy modificados e instrumentados, a fim de se captar as variações de temperatura do material, microestrutura resultante e tensões residuais no material. Por fim, comparam-se os resultados experimentais aos obtidos pelo modelo numérico, de modo a permitir a validação ou rejeição deste ou identificar suas limitações.

Outra aplicação possível para o modelo é o cálculo de distorções geométricas em peças temperadas, função que a ferramenta computacional desenvolvida também se mostrou capaz de executar, com a ressalva de não estimar o efeito da oxidação nas camadas superficiais do material.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Esta revisão da literatura foi dividida em três partes, sendo que na primeira são abordados, brevemente, os aspectos mais relevantes relativos aos aços e aos tratamentos térmicos aplicáveis a esses materiais, com destaque para o processo de têmpera, o uso de diagramas de transformação de fase e as características peculiares de cada tipo de transformação. Em seguida, introduz-se o conceito de problema termo-mecânico-microestrutural acoplado e apresentam-se equações e modelos matemáticos desenvolvidos por diversos pesquisadores ao longo dos anos para sua resolução. Nesta segunda parte, apresentam-se, ainda, diferentes formas de implementação numérica e computacional desses modelos, analisando as vantagens e desvantagens de cada uma, para posterior proposição de um novo modelo de cálculo de transformações de fase em aços. Por fim, pondera-se sobre os elementos para a validação do modelo numérico com a comparação com os resultados experimentais, considerando os detalhes sobre o ensaio Jominy, a metalografia dos aços e a correlação com as tensões residuais geradas.

2.1 Aços

Os aços são ligas de ferro com até 2,1 % de carbono¹, podendo conter outros elementos de liga tais como Cr, Mn, Si, Mo, V, Nb, W, Ti, Ni. São um tipo de material metálico comumente utilizado na fabricação de ferramentas, peças industriais, estruturas de sustentação no setor de construção e outras aplicações das mais variadas. Este vasto conjunto de aplicações dos aços se deve ao baixo custo de obtenção, associado à grande versatilidade de propriedades que se pode obter a partir de mudanças na composição química, tratamentos térmicos e/ou superficiais e demais processamentos (METALS HANDBOOK, 2001).

São as alterações macro e microscópicas do material que determinam as suas propriedades. As variações na microestrutura do material provêm da formação, alteração da quantidade, tamanho, forma e distribuição dos microconstituintes ou fases presentes (TSCHIPTSCHIN et al., 1988). Tais microconstituintes têm na

¹ O teor de 2,11% de C é considerado como sendo a separação teórica entre aços e ferros fundidos, de forma que, para teores até 2,11% têm-se os aços, acima deste, os ferros fundidos.

composição química do aço o principal fator para sua determinação, aliado aos processos de fabricação, principalmente o tratamento térmico.

Além da divisão arbitrária entre aços e ferros fundidos, há uma diferenciação entre os aços, de acordo com a porcentagem de carbono presente na estrutura. O ponto eutetóide corresponde à menor temperatura de equilíbrio entre a ferrita, a perlita e a austenita, correspondendo a cerca de 0,77% de carbono numa liga ferro-carbono. Assim, os aços podem ser eutetóides, hipoeutetóides ou hipereutetóides, caso apresentem porcentagens em massa de carbono iguais, inferiores ou superiores a 0,77%, respectivamente (TSCHIPTSCHIN et al., 1988).

2.1.1 Estrutura Cristalina dos Aços

O ferro puro apresenta, à temperatura ambiente, estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC), denominada ferrita alfa (α), que é estável até 912°C. A partir desta temperatura, a estrutura CCC sofre uma transformação alotrópica para a estrutura cúbica de faces centradas (CFC), denominada ferro gama (γ) ou austenita, que é estável entre as temperaturas de 912 e 1394°C.

Na temperatura de 1394°C ocorre uma nova transformação alotrópica, de forma que a estrutura CFC da austenita retorna à configuração CCC, e passa a ser denominada ferrita delta (δ), estável até a temperatura de 1538°C, que é a temperatura de fusão do Fe puro.

A Figura 1 e a Figura 2 ilustram as estruturas cristalinas CFC e CCC, respectivamente. Como será discutido em capítulos posteriores, nos casos dos aços, a presença de átomos de carbono, de menor tamanho que os átomos de ferro, acrescenta peculiaridades a essas transformações, de forma que a alteração na estrutura cristalina (da estrutura CFC para a estrutura CCC ou ainda para outras configurações) ocorre simultaneamente a uma alteração no volume ocupado pelos átomos da estrutura (TOTTEN e HOWES, 1997).

Segundo a nomenclatura aqui apresentada, pode-se, então, especificar alguns dos principais microconstituintes do aço:

- **Austenita:** solução sólida intersticial do carbono e dos elementos de liga em ferro gama.

- **Ferrita:** solução sólida intersticial do carbono e dos elementos de liga em ferro alfa.
- **Cementita:** carboneto de ferro (Fe_3C).
- **Grafita:** variedade alotrópica do carbono (estrutura cristalina hexagonal).
- **Perlita:** misto de ferrita e cementita.
- **Bainita:** agregados de ferrita e cementita formados numa faixa de temperatura situada entre a formação da perlita fina e a formação da martensita
- **Martensita:** solução sólida super saturada de carbono em ferro, com estrutura TCC.

Figura 1 – Estrutura cristalina cúbica de face centrada (CFC) (CALLISTER, 2002).

As transformações e alternâncias entre esses diversos microconstituintes são acompanhadas pela variação na estrutura cristalina do material e provocam, além de mudanças nas propriedades térmicas e mecânicas, alterações volumétricas e variações na taxa de expansão volumétrica ao longo do material, causando diferenças de deformações plásticas, gerando, entre outras solicitações internas, as tensões residuais por transformação de fase.

Figura 2 – Estrutura cristalina cúbica de corpo centrada (CCC) (CALLISTER, 2002).

2.2 Tratamentos Térmicos dos aços

Tratamento térmico é o conjunto de operações usadas para alterar as propriedades físicas e/ou químicas de um material, conferindo-lhe características determinadas, que consiste no aquecimento e resfriamento de um material sob condições controladas de tempo, temperatura, atmosfera e velocidade de resfriamento, ou seja, é o processo de aquecer e resfriar controladamente um material visando modificar suas propriedades mecânicas (UNTERWIESER et al., 1982).

As propriedades dos aços estão diretamente ligadas à sua estrutura, e, portanto, os tratamentos térmicos visam, em maior ou menor escala, modificá-las. As principais razões para se aplicar esse processo são a remoção das tensões internas oriundas de processos de fabricação precedentes, o aumento ou redução da dureza do material ou sua resistência mecânica e a melhoria da ductilidade, usinabilidade e resistência ao desgaste e à corrosão.

Estes diferentes arranjos da estrutura cristalina dos aços equivalem a diferentes fases ou microconstituintes, sendo que para a obtenção de cada fase há um tipo de tratamento térmico específico.

2.2.1 Têmpera

Dentre os tratamentos térmicos, é comum o uso do processo de têmpera, que consiste em um resfriamento rápido e controlado do material, que anteriormente foi aquecido visando a austenitização total ou parcial deste. Ou seja, procede-se com o aquecimento do material em forno até atingir a temperatura de austenitização do aço principalmente para que os carbonetos dos elementos de liga se dissolvam e, em seguida, resfria-se a peça tratada em meio refrigerante adequado.

Tomando como exemplo o caso de aços hipoeutetóides, e considerando que o material é mantido em processo de aquecimento até que se obtenha uma homogeneidade nos valores das temperaturas, acima da temperatura de austenitização, consegue-se fazer com que todo o material esteja austenítico. Segue-se, então, um resfriamento, de tal forma que se consiga evitar a transformação da austenita nos seus produtos de decomposição de mais alta

temperatura (ferrita ou cementita + perlita), dando lugar preferencialmente à transformação em martensita. Dependendo da velocidade de resfriamento a que é submetido o material, obtém-se uma determinada proporção entre as diferentes fases do material, o que determinará as características físicas e mecânicas para o material, entre as quais se pode citar dureza, tenacidade, ductilidade, entre outras (American Society for Metals, 1990).

Desse modo, a principal transformação de fase que ocorre no processo de têmpera é a transformação da austenita em martensita. Como exemplo, podem-se tomar como referência curvas de resfriamento arbitrárias, sobrepostas a diagramas de transformação de fase de um aço genérico (American Society for Metals, 1990) conforme apresentado nas Figuras 3 e 4, indicando diferentes taxas de resfriamento e, conseqüentemente, transformações da austenita em diferentes fases. A formação de cada uma das diferentes fases acontece quando há intersecção de uma das linhas do diagrama de transformação com a curva de resfriamento de um dos pontos do material.

Figura 3 – Curvas de resfriamento sobrepostas à curva TTT de um aço genérico, indicando as transformações de fase em cada região do material. Curva em vermelho pode se referir à superfície de um cilindro e curva amarela ao centro do mesmo cilindro. Adaptado de American Society for Metals (1990).

Para temperaturas superiores à temperatura M_s , que é conhecida como a temperatura para a qual tem início a transformação em martensita, todo o aço apresenta-se com estrutura austenítica, que é uma estrutura cúbica de face centrada

(CFC). Quando ocorre seu resfriamento a temperaturas inferiores a M_s , e desde que a curva de resfriamento não atinja outras regiões do diagrama de transformação, inicia-se a transformação em martensita, que é uma estrutura tetragonal de corpo centrado (TCC²). Porém, em alguns casos, nem todo o material se transforma em martensita, e outras fases surgem, dependendo da taxa de resfriamento e da curva de transformação do material.

Nos gráficos, as curvas de resfriamento em amarelo podem representar o centro da peça tratada termicamente, e em vermelho, a superfície. Na Figura 3, a maior taxa de resfriamento faz com que a transformação martensítica aconteça para quase toda peça, enquanto que, na Figura 4, a formação de martensita está limitada aos pontos mais próximos à superfície, uma vez que o resfriamento rápido só é atingido nessas áreas.

Figura 4 – Curvas de resfriamento, com taxa de resfriamento menor, sobrepostas à curva TTT de um aço genérico, indicando as transformações de fase em cada região do material. Curva em vermelho pode se referir à superfície de um cilindro e curva amarela ao centro do mesmo cilindro. Adaptado de American Society for Metals (1990).

² A martensita pode, ainda, apresentar a estrutura cúbica de corpo centrado (CCC) em aços com baixo teor de carbono ou para outras ligas diferentes dos aços. A estrutura TCC é obtida devido à supersaturação em átomos de carbono e para sua formação é preciso haver deformações fortes na rede cristalina, de forma que o resultado final é uma estrutura tetragonal.

2.3 Diagramas de Transformação de Fase

Os aços para construção mecânica não se restringem a ligas binárias Fe-C, apresentando quantidades residuais de Si, Mn, P e S, decorrentes do processo de elaboração, e de outros elementos que são adicionados propositalmente para se garantir determinada característica ou propriedade mecânica. Mesmo assim, o diagrama Fe-C, ou mais precisamente o diagrama Fe-Fe₃C³, é extensivamente empregado em estudos envolvendo aços carbono e aços baixa-liga.

Para a obtenção das propriedades desejadas, pode-se selecionar a composição química, os materiais e os tratamentos térmicos mais convenientes, utilizando-se um diagrama de equilíbrio Fe-C. Este tipo de gráfico indica as fases presentes em todas as combinações possíveis da liga Fe-C em diversas temperaturas, através de um mapeamento das transformações de fase que acontecem em condições de equilíbrio (TSCHIPTSCHIN et al., 1988).

Figura 5 – Diagrama de fase Fe-C, indicando as transformações de fase que ocorrem em condições de equilíbrio. Adaptado de Pollack (1988).

³ Há dois tipos de diagramas Fe-C, o diagrama Fe-C estável, que mostra o equilíbrio entre o Fe e a grafita, e o diagrama Fe-Fe₃C, metaestável, que apresenta o equilíbrio entre o ferro e a cementita (Fe₃C). Em virtude de as velocidades de resfriamento no processamento dos aços serem elevadas em relação às condições de equilíbrio, o diagrama empregado como ferramenta para o estudo de aços ao carbono e ferros fundidos brancos é o diagrama Fe - Fe₃C.

A Figura 5 apresenta uma parcela do diagrama de fases Fe-C. Pode-se observar que o ponto que corresponde a uma composição de 2,1% de carbono a 1148°C representa uma fronteira entre as ligas ferro-carbono que são caracterizadas como aços e as ligas que são caracterizadas como ferros fundidos. Assim, aço é uma liga com menos de 2,1% de carbono e ferro fundido é uma liga com mais de 2,1% de carbono. A escolha deste ponto deve-se ao fato de que, quando se resfria um aço desde o estado líquido, este sempre passará por uma faixa de temperaturas em que a sua microestrutura será composta de uma única fase denominada austenita, o que não acontece para os ferros fundidos. É a existência dessa região no diagrama Fe-C que diferencia aços de ferros fundidos e é a partir dela que são formadas diversas fases presentes nos aços à temperatura ambiente (COLPAERT, 1989).

Entretanto, para prever as relações entre composição química e microestrutura nas transformações dos aços fora do equilíbrio, nas quais, além da ação exercida pela temperatura, há influência do tempo, representado pela taxa de resfriamento do material, é necessária a utilização de curvas TTT (tempo, temperatura e transformação) isotérmicas ou de resfriamento contínuo. Esses diagramas descrevem as reações que ocorrem nas situações e temperaturas em que a austenita está instável⁴. Devido ao resfriamento rápido, a energia livre da austenita passa a ser maior que a de produtos mais estáveis, de modo que essa energia adicional é então liberada através da formação de produtos mais estáveis, como a ferrita e cementita (perlita). Além disso, é necessária a difusão dos elementos, que, por sua vez, depende do tempo e da temperatura (CHUMBLEY, 2005).

A Figura 6 ilustra uma curva TTT genérica. Este tipo de gráfico é utilizado quando as transformações ocorrem fora da condição de equilíbrio. Diferentemente do caso das transformações que ocorrem no equilíbrio, pode-se perceber a presença de outras fases, metaestáveis (não presentes no diagrama de equilíbrio), como a martensita, formada a partir de temperaturas inferiores a M_s , isoterma que representa o início de transformação martensítica e que fica geralmente entre os 200 e 300°C. As curvas TTT indicam, ainda, o início e o fim de cada transformação.

⁴ A instabilidade da austenita pode ser avaliada pelo potencial termodinâmico para a transformação, ou seja, a diferença entre a energia livre na temperatura eutetóide (temperatura de estabilidade da austenita) e na temperatura de transformação.

Figura 6 – Diagrama TTT genérico de um aço, indicando as transformações de fase que ocorrem fora do equilíbrio. Adaptado de Chiaverini (1986).

2.3.1 Curvas de Transformação Isotérmica - TI

As curvas de transformação isotérmica são construídas a partir de um rápido resfriamento seguido de uma estabilização da temperatura por um tempo que permita a completa transformação do aço, ou seja, o material é austenitizado e, em seguida, resfriado bruscamente, atingindo uma temperatura na qual permanece até se completarem as transformações. Dessa forma, as transformações são dependentes do tempo e a quantidade de material transformado (fração volumétrica) será dependente do tempo que o material permaneceu a uma temperatura constante relativa àquela transformação. Geralmente, nessas situações, ocorre a formação de microestruturas uniformes, homogêneas, constituídas em quase 100% por um mesmo microconstituinte para toda a seção do corpo de prova ou peça tratada termicamente (UNTERWIESER, 1982).

A Figura 7 mostra o diagrama isotérmico de um aço eutetóide que, numa situação inicial, está completamente austenitizado e, então, é resfriado até a temperatura em que se deseja que ocorra a transformação. A curva 1 mostra um resfriamento rápido da temperatura inicial até 160°C, seguida pela manutenção do material a essa temperatura por 10s. A esta temperatura, metade da austenita se

transforma em martensita e a outra metade permanece na forma de austenita. Na curva 2, vê-se um resfriamento rápido até a temperatura de 250°C. Essa temperatura é mantida por 100s, mas, como nenhuma das linhas do diagrama de transformação foi atravessada pela linha isotérmica, nenhuma transformação ocorreu. O resfriamento posterior do material até a temperatura ambiente resulta em uma microestrutura final composta integralmente por martensita⁵.

Figura 7 – Trajetórias arbitrárias temperatura-tempo sobre o diagrama de transformação isotérmica. Adaptado de Reed-Hill (1982).

A curva 3 indica um resfriamento rápido até 300°C e manutenção da temperatura por 500s. A curva de início da transformação bainítica é atravessada pela linha isotérmica, de forma que 50% do material se transforma em bainita. Com resfriamento subsequente até a temperatura ambiente, toda a austenita restante transforma-se em martensita, resultando em uma microestrutura final composta por 50% de bainita e 50% de martensita.

Na curva 4, o resfriamento até 600°C e a manutenção da temperatura por 10000s resultam em uma microestrutura final composta totalmente por perlitita. O resfriamento que se segue não altera a microestrutura em nada, independente da velocidade de resfriamento empregada.

⁵ Isso acontece porque a transformação martensítica é atérmica, como será discutido em capítulo posterior.

um deslocamento das linhas de transformação para a direita e para baixo, o que indica transformações mais lentas devido a um retardo do período de início das transformações difusivas (MARTINS, 2002).

Além disso, para as transformações em resfriamento contínuo haverá sempre uma mistura dos produtos das transformações, devido ao fato de que as transformações ocorrem em várias temperaturas. Quanto mais rápido o resfriamento, mais heterogênea será a microestrutura. Em geral, para resfriamentos lentos será formada perlita grosseira, enquanto que maiores velocidades de resfriamento permitem a ocorrência simultânea de perlita, bainita e martensita na microestrutura (TSCHIPTSCHIN et al., 1988).

2.4 Transformações de Fase em Aços

A evolução da microestrutura do aço a partir da austenita é um processo complexo e dinâmico que envolve transformações simultâneas de diferentes tipos de fases. Todos os produtos concorrem por regiões de nucleação, que são limitadas, por recursos e por espaço. Uma condição de resfriamento rápido pode, ainda, preservar a austenita em regiões de baixa temperatura, de modo que uma estrutura mais fina prevaleça. Além disso, a taxa de criação de núcleos nas fronteiras dos grãos de austenita e as taxas de crescimento das fases individuais interagem entre si e com outros fenômenos (CHEN, 2009). Dessa forma, as transformações metalúrgicas dos aços estão associadas a outros inúmeros fenômenos físicos, simultâneos à alteração microestrutural. Entre eles, podem-se citar, ainda, a alteração de volume (expansão ou contração volumétrica), a geração de calor, a difusão de elementos, a migração de carbono através de interstícios, precipitação de carbonetos, oxidação, alteração do tamanho de grão e distribuição das fases.

As transformações de fase se processam em duas etapas, sendo que na primeira, a nucleação, há a formação de núcleos (embriões) da nova fase em meio àquela que se transforma. A nucleação ocorre preferencialmente nos contornos de grão da fase original. Quando estes núcleos atingem um tamanho mínimo necessário para estabilidade termodinâmica (raio crítico), tornam-se capazes de crescer. Tem-se, então, a segunda etapa, o crescimento, quando os núcleos estáveis da nova fase têm seu tamanho aumentado, e o volume da fase original

diminui. Caso seja permitido que o crescimento prossiga até que a condição de equilíbrio seja atingida, a transformação termina (CAHN, 1956).

Como exemplo, considere uma liga Fe-C com a composição eutetóide (0,76%C) à temperatura de 790°C, ou seja, que apresenta integralmente a fase austenita. A austenita é a fase base para início do processo de têmpera, sendo que a partir do seu resfriamento são obtidas outras fases, como ilustra o diagrama da Figura 9. Esta estrutura possui espaços interatômicos ligeiramente menores que os átomos de carbono, de forma que a dissolução deste componente na austenita introduz deformações na estrutura. Resfriando o material abaixo da temperatura de 727°C, a austenita se transformará em cementita e ferrita, formando uma microestrutura totalmente perlítica. Entretanto, essa transformação não ocorre instantaneamente, de modo que o tempo necessário para que essa ou outra transformação de fase ocorra depende, principalmente, de dois fatores: a criação de pequenas regiões das novas fases (núcleos) e a velocidade com que os átomos se movimentam na rede cristalina para formar as novas fases. Em outras palavras, tem-se um tempo de nucleação e crescimento. Conforme a temperatura e a taxa de resfriamento, as microestruturas resultantes serão bastante diferentes. Em temperaturas elevadas, o potencial termodinâmico para que o material se transforme é baixo (baixa taxa de nucleação), mas depois de estabelecidos os núcleos, a velocidade de crescimento aumenta, uma vez que os átomos se movimentam de forma mais rápida em temperaturas elevadas. Ocorre o contrário para temperaturas baixas e nas temperaturas moderadas, observa-se um caso intermediário. A maioria das transformações de fase exige um tempo finito para se processar por completo. A taxa de transformação na condição de equilíbrio é tão lenta que microestruturas em total equilíbrio raramente são obtidas.

Figura 9 – Produtos da têmpera oriundos da transformação da austenita.

Além disso, dependendo da forma como é feito o resfriamento do material, parte da austenita pode não passar por nenhuma transformação, de modo que se pode obter uma microestrutura resultante composta em parte pelos microconstituintes formados pela transformação da austenita e em outra parte por austenita residual, também chamada de austenita retida.

A transformação da austenita em martensita pelo processo de têmpera em aços é um dos processos principais e mais comuns para se obter um aumento da resistência mecânica do material. A principal contribuição para esse aumento de resistência é dada pela estrutura tetragonal de corpo centrado (TCC) formada a partir da austenita. Essa estrutura é obtida porque, com o resfriamento rápido e em temperaturas inferiores a M_s , não há tempo suficiente para a difusão do carbono. Isso leva a uma solução sólida com supersaturação em carbono e a uma distorção do reticulado cristalino pela formação da estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado. Esta estrutura está associada ao surgimento de barreiras e tensões internas que restringem a movimentação de discordâncias (BERRAHMOUNE, 2006), o que leva a um grande aumento de resistência mecânica. Nesse rearranjo da estrutura cristalina que ocorre na transformação de fase de austenita (estrutura CFC) para martensita (estrutura TCC) há uma expansão no volume ocupado pelo material (aproximadamente 4%), em parte provocada pela presença do átomo de carbono deslocado na estrutura.

Figura 10 – Transformação martensítica, com evolução da estrutura CFC para a estrutura TCC. Adaptado de Callister (2000) e Reed-Hill (1982).

Tomando para análise geral o fenômeno de transformação de fase martensítica presente nos tratamentos térmicos de têmpera, constata-se que estas transformações são processos não-difusivos que ocorrem a velocidades muito elevadas envolvendo fases sólidas. A causa dessas transformações é atribuída à

diferença de energia livre entre as estruturas constituintes envolvidas no processo (WASILEVSKI, 1975). Essas transformações apresentam como principais características a não-dependência do tempo, forte dependência da temperatura e a propriedade de reversibilidade.

A transformação martensítica depende, então, unicamente da temperatura, pois não existe difusão (transformação adifusional). Ainda que independa do tempo, o resfriamento deve ser rápido o bastante de modo que a austenita não se transforme antes em outra estrutura.

A temperatura de início da transformação, M_s , pode ser diminuída pelo acréscimo de carbono ou de elementos de liga substitucionais. Várias equações descrevem a variação da temperatura M_s em função da composição química do material, como, por exemplo, a Equação (1), obtida de Sklyuev (1967):

$$M_s (^{\circ}C) = 561 - 474(\%C) - 33(\%Mn) - 17(\%Ni) - 17(\%Cr) - 21(\%Mo) \quad (1)$$

A **Erro! Fonte de referência não encontrada.** traz o esquema da célula unitária da estrutura TCC, enquanto a **Erro! Fonte de referência não encontrada.** mostra a evolução da estrutura cristalina durante a transformação martensítica.

Em outros tipos de transformações de fase, ocorre uma alteração da estrutura CFC para a estrutura CCC, de forma que também há uma alteração no volume ocupado pela estrutura. Desse fenômeno resultam os valores de expansão volumétrica observados durante a mudança de fase. Ao contrário da transformação martensítica, as transformações perlítica, bainítica e ferrítica têm natureza difusional, ou seja, dependem da difusão de átomos de carbono, de forma que são dependentes da temperatura e do tempo de transformação. Assim, quando a austenita é resfriada abaixo de certa temperatura, dá-se uma reação na qual a ferrita e o carboneto (cementita) nucleiam e crescem juntos, de forma que o carbono é rejeitado pela ferrita e simultaneamente consumido pelas lamelas de cementita que contornam a ferrita. O produto resultante varia de acordo com a faixa de temperatura em que se dá a transformação, podendo gerar estruturas perlíticas, bainíticas ou ferríticas.

2.5 O Problema Termo-Mecânico-Microestrutural Acoplado

Pode-se considerar que para o correto modelamento numérico dos processos de tratamento térmico, faz-se necessária a resolução de um problema acoplado termomecânico e de transformação de fase dos aços, visto que as causas e efeitos da transferência e condução de calor no material, das transformações de fase provocadas e das tensões residuais originadas do processo se sobrepõem umas às outras (INOUE, 1975, 2004).

A Figura 11, adaptada de Inoue (2004), apresenta um diagrama esquemático ilustrando a complexidade das interações entre alterações metalúrgicas do material, o campo de temperaturas e os campos de tensões e deformações no material. A figura representa, ainda, o acoplamento entre os fenômenos termomecânicos e de transformação de fase e detalhes dos fatores mais importantes e as relações entre estes.

Figura 11 – Diagrama das relações entre os problemas acoplados na transformação de fase de aços. Adaptado de Inoue (2004).

A complexidade do problema acoplado explica, em parte, o porquê de, ao longo dos anos, pesquisadores atacarem esses problemas aos pedaços, por partes, isolando cada uma das interações, ainda que as teorias relacionadas à transferência de calor, mecânica dos sólidos e metalurgia física já estivessem bem estabelecidas (HARDIN E BECKERMAN, 2005).

A respeito das relações da Figura 11, tensões térmicas e deformações são induzidas pela não uniformidade da distribuição de temperaturas no material. Transformações de fase ocorrem para minimizar a energia livre no material e podem

afetar o campo de temperaturas através da liberação ou absorção do calor latente da transformação. Geralmente, algumas dessas interações têm pouca influência sobre o campo de temperaturas quando o nível de deformações é pequeno. As transformações de fase, por sua vez, frequentemente produzem deformações no material (causadas pela diferença entre os volumes específicos das fases envolvidas no processo de transformação da microestrutura), além de alterações de volume e mudanças nas propriedades mecânicas do material, com consequências no campo de tensões. Adicionalmente, pode ocorrer aquecimento por deformação plástica. Por fim, tensões e deformações podem ter uma influência importante na cinética das transformações de fase. Deformações plásticas locais e fluxo de material podem ocorrer quando as solicitações externas, ou mesmo internas, excedem a tensão de escoamento do material. Podem ocorrer mudanças de fase causadas por deformações plásticas (mesmo em tensões abaixo do escoamento do material). A variação das frações volumétricas durante a transformação de fase leva a alterações nas propriedades mecânicas (PACHECO et al., 2001).

2.5.1 Efeito da temperatura na geração de tensões e deformações

Durante o resfriamento de uma peça tratada termicamente, é muito comum a presença de gradientes de temperatura ao longo do material, uma vez que a extração de calor geralmente ocorre a partir da superfície. Isso leva a temperaturas menores nas regiões próximas à superfície e maiores no interior da peça. Como a alteração de temperatura leva a contrações ou expansões volumétricas, o gradiente de temperaturas no material induz a ocorrência de alterações volumétricas desiguais ao longo do material, podendo gerar deformações plásticas.

Para o cálculo das tensões e deformações de origem térmica é necessário a definição do coeficiente expansão térmica, α_T , que define a expansão térmica total a partir de uma temperatura de referência, θ^0 . Os valores dos coeficientes de expansão térmica são comumente apresentados nas tabelas de propriedades de materiais.

De acordo com a Figura 12, a deformação térmica gerada pode ser expressa por:

$$\epsilon^{th} = \alpha_T(\theta, f_\beta)(\theta - \theta^0) - \alpha_T(\theta^I, f_\beta^I)(\theta^I - \theta^0) \quad (2)$$

Figura 12 – Definição do coeficiente de expansão térmica

Sendo $\alpha_T(\theta, f_\beta)$ o coeficiente de expansão, θ a temperatura final, θ^I a temperatura inicial, f_β são as possíveis variáveis de dependência para o coeficiente (além da temperatura) e θ^0 é a temperatura de referência. Na forma diferencial, a expansão térmica total pode ser descrita por

$$d\epsilon^{th} = \alpha_T'(\theta) d\theta \quad (3)$$

onde $\alpha_T'(\theta)$ é a tangente da curva deformação temperatura (Figura 12). Integrando-se a Equação (3), obtém-se

$$\epsilon^{th} = \int_{\theta^0}^{\theta} \alpha_T' d\theta \quad \rightarrow \quad \alpha_T(\theta) = \frac{1}{\theta - \theta^0} \int_{\theta^0}^{\theta} \alpha_T' d\theta \quad (4)$$

A temperatura de referência, θ^0 , é empregada com o intuito de garantir que as deformações térmicas iniciais sejam nulas, independente da temperatura inicial, θ^I , ser igual ou não à temperatura de referência. Dessa forma, o segundo termo da Equação (2) representa a deformação devido à diferença entre a temperatura inicial e a temperatura de referência.

Obtidas as deformações térmicas, as tensões térmicas elásticas podem ser calculadas pela simples utilização da lei de Hooke (relação linear entre tensões e deformações), onde E é o módulo de elasticidade do material.

$$\sigma^{\text{th}} = -E\epsilon^{\text{th}} \quad (5)$$

$$\sigma^{\text{th}} = -E\alpha_T(\theta - \theta^I) \quad (6)$$

Uma análise com mais detalhes é encontrada no capítulo 2.10, no qual é feita uma diferenciação entre tensões térmicas e tensões de transformação de fase.

2.5.2 Efeito das tensões e deformações na variação da temperatura

A imposição de carregamentos externos, tensões internas ou deformações ao material podem gerar calor em virtude da energia degradada por deformação plástica.

Na maioria dos casos, essa parcela de calor gerado é muito pequena frente às outras fontes de geração de calor e à variação de temperatura imposta ao material. Os estudos de Risso et al. (2004) indicam que a parcela de calor gerado por trabalho mecânico em um tratamento térmico de têmpera, com uma redução de temperatura de mais de 500 °C, induz uma alteração de temperatura inferior a 1 °C.

O trabalho de Huiping et al. (2007) também avalia o efeito de tensões e deformações aplicadas a um corpo sólido, afirmando que parte dessa energia é perdida na forma de calor. No caso de deformações inelásticas, a geração de calor pode atingir níveis altos e geralmente não deve ser ignorada. Entretanto, avaliando as distorções no material causadas nos processos de têmpera, nota-se que estas são bastante pequenas, na ordem de 2 a 3%, de modo que o calor gerado pela deformação também é pequeno e tem pouca influência na variação de temperatura da peça temperada.

Confirmando essa constatação, Sjöström (1985) afirma que o calor gerado pelo trabalho mecânico na têmpera representa menos de 1% de toda a geração de calor e da taxa de variação de temperatura, correspondendo a uma variação de aproximadamente 2 °C na temperatura. Sendo assim, o calor gerado pelo trabalho mecânico pode ser desprezado quando comparado às variações de temperatura devidas à condução e àquelas induzidas pelo calor latente de transformação.

2.5.3 Efeito da Temperatura na alteração da microestrutura

Conforme já detalhado em capítulos anteriores, a imposição de mudanças de temperatura no material pode implicar em alterações das fases e microestrutura.

Considerando uma amostra de determinado aço a uma temperatura elevada e livre de tensões, e admitindo uma microestrutura austenítica, o comportamento observado na Figura 13 deve ser observado. A Figura 13 apresenta o fenômeno de transformação de fase devida à variação de temperatura, mostrado através da curva deformação-temperatura. Partindo do ponto D, com o decréscimo da temperatura, a estrutura cristalina experimenta uma transformação de fase martensítica (trecho AB) e consequentemente uma auto-acomodação destes cristais martensíticos. Este processo se inicia em $T = M_s$ (ponto A) e se desenvolve até que a temperatura $T = M_f$ (ponto B), abaixo da qual a martensita é estável, seja alcançada. Elevando-se a temperatura, a partir do ponto B, ao atingir A_s (ponto C), observa-se uma transformação de fase inversa (trecho CD), que persiste até que a temperatura A_f seja alcançada (ponto D).

Este fenômeno pressupõe três regiões distintas. Duas delas relacionadas aos trechos lineares que correspondem à expansão térmica das fases austenítica e martensítica e uma região onde há um laço de histerese relacionado aos trechos de transformação de fase (PAIVA e PACHECO, 2003).

Figura 13 – Transformação de fase devida à variação de temperatura. Adaptado de Teixeira (2002).

Assim se dá entre a austenita e todas as fases geradas pela sua decomposição, de forma que é nos diagramas de transformação que os tempos e temperaturas dessas transformações são condensados.

2.5.4 Efeito da microestrutura na variação de temperatura

Às mudanças de fase estão associadas reações químicas que absorvem ou liberam calor para ocorrerem. Por esse motivo, ao modelar a condução de calor no material durante a transformação do aço na têmpera, é necessário conhecer as entalpias, H_i^π , das diferentes fases a fim de estimar a variação de temperatura associada a cada transformação.

A diferença entre entalpias das duas fases a uma temperatura θ_i é conhecida como calor latente de transformação, ΔH_i^L . Dessa forma, como é apresentado na Tabela 1, um determinado calor latente de transformação está relacionado a toda transformação de fase. No caso da decomposição da austenita:

$$\Delta H_i^L = H_i^\gamma - H_i^\pi \quad (6)$$

Onde H_i^γ é a entalpia da austenita a uma temperatura θ_i e H_i^π a entalpia da nova fase formada, com π podendo representar ferrita, perlita, bainita ou martensita.

Com a geração interna de calor, o problema térmico deve ser tratado pelas equações de transferência de calor que incluam o calor latente de transformação devido a cada transformação de fase. Admitindo uma geometria cilíndrica e uma convecção atuante na superfície externa do material, a equação de balanço de energia fornece:

$$\rho C_p \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \sum_{\pi} \Delta H_{\pi} \frac{dV_{\pi}}{dt} \quad (7)$$

Tabela 1 – Variação das entalpias de transformação para os diferentes produtos da decomposição da austenita. (Fonte: Lee e Lee, 2008).

Transformação	ΔH_i^L	Calor Latente associado(J/m³)
austenita→ferrita	ΔH^F	$5,95 \times 10^8$
austenita→bainita	ΔH^B	$5,12 \times 10^8$
austenita→perlita	ΔH^P	$5,26 \times 10^8$
austenita→martensita	ΔH^M	$3,14 \times 10^8$

Enquanto que a convecção na superfície pode ser expressa por:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial t} = h(T)(T_s - T_q) \quad (8)$$

e a condução no interior do material pela lei de Fourier:

$$q = -\lambda \nabla T \quad (9)$$

Nas Equações (7) a (9), ρ é a densidade, C_p é o calor específico, λ é a condutividade térmica, r é a distância radial, T a temperatura e t o tempo, ΔH_i é o calor latente da decomposição da austenita em uma nova fase π . V_π é a fração volumétrica da fase π , $h(T)$ é o coeficiente de transferência de calor, dependente da temperatura, T_s é a temperatura da superfície e T_q a temperatura do ambiente ou meio em que ocorre a têmpera. Por fim, q é o fluxo de calor.

As propriedades térmicas (C_p e λ) podem ser determinadas pela lei linear das misturas, em função da temperatura e das fases formadas (EMBURY e HAN, 2004) e desconsiderando-se os efeitos da disposição espacial dos microconstituintes.

2.5.5 Efeito da microestrutura na geração de tensões e deformações

As mudanças de fase no material e as expansões volumétricas associadas a esse fenômeno causam deformações no material e consequentemente tensões de transformação (EBERT, 1978).

Estudos experimentais (HUIPING et al., 2007) revelam a ocorrência de uma deformação macroscópica, envolvendo alteração da forma, quando um único cristal austenítico (que possui uma estrutura bem ordenada cúbica de face centrada) dá origem a um único cristal martensítico (cúbico de corpo centrado⁶ ou tetragonal de corpo centrado). Este cristal martensítico possui a forma de placa e, durante sua nucleação, é identificada uma interface ou plano de contato entre as duas fases (austenita e martensita), conhecida como plano de hábito. Já no caso da formação

⁶ Para aços com baixa porcentagem de carbono, a martensita pode apresentar a estrutura CCC (Borges et al., 1988).

de diversos cristais simultaneamente, aparecem problemas de acomodação entre os novos cristais martensíticos e os cristais austeníticos pré-existentes. Se não houver direção preferencial para os novos cristais, estes aproveitam a existência de diferentes planos de hábito possíveis, para formar diversas variantes (mesmas microestruturas com orientações diferentes) (HUIPING et al., 2007).

Caso haja uma direção preferencial, em geral induzida por um estado de tensões, todos os cristais obedecem a este plano de hábito favorável, constituindo assim, o processo de reorientação.

Tabela 2 – Expressões gerais da variação volumétrica em cada transformação de fase em função do teor de carbono da liga e valores calculados para o aço SAE 4140. Adaptado de Totten e Howes (1997)

Transformação	Mudança de Volume (Equação Genérica)	Mudança de Volume (Aço SAE 4140)
Perlita esferoidizada → Austenita	$-4,64 + 2,21x(\%C)$	-3,756%
Austenita → Martensita	$4,64 - 0,53x(\%C)$	4,428%
Perlita esferoidizada → Martensita	$1,68.(\%C)$	0,672%
Austenita → Bainita inferior	$4,64 - 1,43x(\%C)$	4,068%
Perlita esferoidizada → Bainita inferior	$0,78x(\%C)$	0,312%
Austenita → Bainita superior	$4,64 - 2,21x(\%C)$	3,756%

A Tabela 2, retirada de Totten e Howes (1997), traz expressões que indicam a variação do volume para cada tipo de transformação de fase em função da porcentagem de carbono na liga, além de indicar os valores dessas variações para o aço SAE 4140. Esses valores devem ser considerados em um modelo computacional a fim de representar corretamente a expansão volumétrica na transformação de fase dos aços e, com isso, permitir o cálculo e avaliação dessa contribuição na geração das tensões residuais.

2.5.6 Efeito de tensões e deformações na alteração da microestrutura

Quando uma transformação de fase ocorre na presença de tensões internas ou tensões aplicadas, as mudanças de dimensão do material são afetadas pela magnitude das tensões, como se o material tivesse sido sujeito a uma deformação

plástica, mesmo para estados de tensão abaixo da tensão de escoamento do material. A Plasticidade induzida por transformação de fase (do inglês “*Transformation Induced Plasticity*” - TRIP) pode ser definida como a deformação plástica anômala observada quando transformações metalúrgicas ocorrem sob uma tensão externa muito menor que o limite de escoamento (PACHECO et al., 2003).

Outro exemplo de fenômeno relevante da influência de tensões sobre as alterações microestruturais é que o tempo para a transformação perlítica é reduzido quando o material está sob tensões trativas e aumentado quando sob tensões compressivas. Além disso, a temperatura M_s de início da transformação martensítica é aumentada quando o material está sob carregamento (HUIPING, 2007).

Em termos de modelos numérico-computacionais, Argyris et al. (1985) simularam a deformação plástica devida à transformação. Entretanto, Camarão (1998), em sua tese de doutorado sobre o estudo da têmpera em cilindros de aço, não considera a plasticidade induzida por transformação nem a influência das frações parciais no cálculo das propriedades para cada material. Bokota e Iskierka (1998), ainda que considerem as transformações martensítica, perlítica e bainítica, também não consideram a plasticidade induzida por transformação.

Este trabalho não irá tratar sobre os fenômenos de plasticidade induzida por transformação, tomando como hipótese que os materiais tratados termicamente partem de um estado inicial livre de tensões e deformações.

2.5.7 Propriedades físicas em função da temperatura e da microestrutura

A influência que o campo de temperaturas e as transformações de fase exercem sobre as propriedades mecânicas de materiais metálicos é fundamental para as aplicações comerciais de tratamento térmico. Por isso, propriedades como módulo de Young, coeficiente de Poisson, tensão de escoamento e outras são apresentadas como funções da temperatura, da concentração de cada componente e, em caso de problemas elasto-visco-plásticos, do tempo (Pacheco et al., 2007).

Pacheco et al. (2007) e Melander (1985) apresentaram uma discussão e expressões para o comportamento das propriedades térmicas e mecânicas do aço SAE 4140H durante a têmpera em função da temperatura. As propriedades analisadas por esses autores estão apresentadas nas Equações (10) a (15), onde E

é o módulo de elasticidade, E_A e E_M são, respectivamente, os módulos de elasticidade da austenita e da martensita, β é fração volumétrica de martensita transformada, P é o Módulo de Plasticidade⁷, em analogia ao módulo de elasticidade, σ_Y é a tensão de escoamento, c_p é o calor específico e λ é a condutividade térmica:

Módulo de Elasticidade (em Pa):

$$E = E_A(1 - \beta) + E_M\beta \quad (10)$$

$$\begin{cases} E_A = 1,985 \times 10^{11} - 4,462 \times 10^7 T - 9,909 \times 10^4 T^2 - 2,059 T^3 \\ E_M = 2,145 \times 10^{11} - 3,097 \times 10^7 T - 9,208 \times 10^4 T^2 - 2,797 T^3 \end{cases} \quad (11)$$

Módulo de Plasticidade (em Pa):

$$P = \begin{cases} 2,092 \times 10^6 + 3,833 \times 10^5 T - 3,459 \times 10^2 T^2, & T \leq 723K \\ 2,259 \times 10^9 - 2,988 \times 10^6 T, & 723 < T \leq 748K \\ 5,064 \times 10^7 - 3,492 \times 10^4 T, & T > 748K \end{cases} \quad (12)$$

Tensão de Escoamento (em Pa):

$$\sigma_Y = \begin{cases} 7,520 \times 10^8 + 2,370 \times 10^5 T - 5,995 \times 10^2 T^2, & T \leq 723K \\ 1,598 \times 10^{10} - 2,126 \times 10^7 T, & 723 < T \leq 748K \\ 1,595 \times 10^8 - 1,094 \times 10^5 T, & T > 748K \end{cases} \quad (13)$$

Calor Específico (em J/Kg.°C):

$$c_p = 2,159 \times 10^2 + 0,548 T \quad (14)$$

Condutividade Térmica (em W/m.°C):

$$\lambda = 5,233 + 1,318 \times 10^{-2} T \quad (15)$$

Bhadeshia (2002), por sua vez, faz algo semelhante, mas diferenciando as propriedades de cada fase, de modo que as propriedades do material serão função da combinação dos valores segundo as frações volumétricas transformadas. A Tabela 3 mostra os valores fornecidos por Bhadeshia (2002), onde α , p , α_b e α' representam, respectivamente, ferrita, perlita, bainita e martensita.

⁷ A expressão para o módulo de plasticidade, também chamado de parâmetro associado ao endurecimento cinemático, expressa no regime de deformação plástica o equivalente ao que é o Módulo de Young para o regime elástico, ou seja, é o quociente entre tensão e deformação para o regime plástico.

**Tabela 3 – Propriedades de cada microconstituente formado a partir da austenita.
Adaptado de Bhadeshia (2002).**

Propriedade	Fase	Temperatura (°C)				
		0	300	600	800	1000
Módulo de Elasticidade (GPa)	γ	200	175	150	124	
	$\alpha + p$	210	193	165	120	
	α_b	210	193	165	120	
	α'	200	185	168	...	
Coeficiente de Poisson	γ	0,291	0,309	0,327	0,345	
	$\alpha + p$	0,280	0,296	0,310	0,325	
	α_b	0,280	0,296	0,310	0,325	
	α'	0,280	0,296	0,310	...	
Coef. de Exp. Volumétrica ($^{\circ}\text{C}^{-1}$)	γ			2,1E-05		
	$\alpha + p$			1,4E-05		
	α_b			1,4E-05		
	α'			1,3E-05		
Condutividade Térmica (W/m. $^{\circ}\text{C}$)	γ	15,0	18,0	21,7	25,1	28,0
	$\alpha + p$	49,0	41,7	34,3	27,0	25,0
	α_b	49,0	41,7	34,3	27,0	25,0
	α'	43,1	36,7	30,1	...	...
Calor Específico (J/Kg. $^{\circ}\text{C}$)	γ	532	564	598	628	660
	$\alpha + p$	484	571	652	735	780
	α_b	484	571	652	735	780
	α'	484	570	650	733	780
Tensão de Escoamento (MPa)	γ	190	110	30	20	15
	$\alpha + p$	360	230	140	30	20
	α_b	440	330	140	30	20
	α'	1600	1480	1260	1000	700

2.6 Modelos Matemáticos

Muitos modelos matemáticos que se baseiam nos fundamentos da termodinâmica e cinética das reações foram desenvolvidos para descrever a cinética da decomposição da austenita, calculando o efeito da taxa de resfriamento e da estrutura austenítica na microestrutura final e estimando as propriedades mecânicas do material obtidas através da transformação de fase.

No decorrer da têmpera, uma fase de estrutura simples, a austenita, transforma-se idealmente em martensita, podendo também dar origem à perlita e bainita, dependendo do tempo de transformação, da temperatura e da taxa de resfriamento.

A cinética das reações no estado sólido e as frações volumétricas das fases transformadas podem ser determinadas pelo modelo JMAK (AVRAMI, 1939), no que se refere aos processos difusionais e para os quais a fração transformada é dependente do tempo. Já para as fases cuja formação é adifusional e a taxa de transformação depende da temperatura e não do tempo, como é o caso da fração volumétrica de martensita, utiliza-se a equação empírica de Koistiner e Marburger (Koistinen e Marburger, 1959).

2.6.1 Transformações Difusionais - O modelo JMAK

A cinética das transformações microestruturais começou a ser intensamente investigada nos anos 1930, quando vários cientistas desenvolveram, de modo independente, um modelo estocástico capaz de descrever a cinética do crescimento de cristais, que experimentalmente obedece a uma curva sigmoideal. Baseado na combinação entre nucleação e taxa de crescimento da nova fase transformada, o modelo de Kolmogorov, Johnson e Mehl e Avrami, conhecido hoje como teoria JMAK, foi amplamente utilizado por metalurgistas e outros cientistas na análise de transformações de fase e um dos primeiros modelos aplicados ao cálculo da decomposição austenítica. Além disso, o modelo tem sido aplicado a vários outros problemas, desde a cristalização de polímeros e deposição em superfícies, até na análise de sistemas ecológicos, cosmologia e replicação de DNA (JUN et. al, 2005).

O modelo JMAK pode ser sintetizado pela equação proposta por Avrami, que descreve, para os processos dominados pela difusão do carbono, a fração volumétrica de cada fase formada quando o material se mantém por determinado tempo t a temperatura constante T :

$$y = 1 - e^{-kt} \quad (16)$$

onde y representa a fração transformada e k é uma constante.

Muitos trabalhos provaram a eficiência do uso desses modelos em simulações de transformações isotérmicas, com difusão controlada na decomposição da austenita, de modo que há uma aceitação geral da validade do modelo de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov para transformações difusionais,

forneendo a fração volumétrica de austenita transformada como função do valor da temperatura (constante por admitir transformação isotérmica) e do tempo. Com essa expressão é possível descrever como o sólido se transforma de uma fase para outra a uma temperatura constante. Esta equação pode, ainda, descrever, especificamente, a cinética de cristalização e ser aplicada genericamente para outras fases em outros materiais (AVRAMI, 1939).

A Figura 14 mostra a evolução da fração volumétrica de austenita transformada na forma de um gráfico em função do tempo, destacando os períodos de nucleação e crescimento da nova fase. Esse comportamento pode ser esperado para as transformações ferrítica, perlítica e bainítica, que envolvem a difusão de carbono, mas não para a transformação martensítica.

Figura 14 – Equação de Avrami na forma de gráfico, representando os períodos de nucleação e crescimento da fase modelada.

2.6.2 Transformações Adifusionais - A Equação empírica de Koistiner e Marburger

O cálculo da decomposição da austenita durante o resfriamento contínuo ainda é um grande desafio no modelamento de tratamentos térmicos, devido às transformações não isotérmicas. Muitas vezes, as transformações não isotérmicas são correlacionadas às transformações isotérmicas, a fim de se utilizar o conhecimento já vasto e solidificado que se tem disponível sobre essas últimas.

Uma vez calculadas as transformações por difusão, a fração volumétrica de martensita formada dependerá unicamente da temperatura que se atinge abaixo de M_s . Para o cálculo da austenita transformada durante transformação da austenita em martensita, que é adifusional, o modelo proposto por Koistinen e Marburger (1959) é amplamente utilizado na literatura.

$$V_\gamma = \exp[-1,10 \cdot 10^{-2}(M_s - T_q)] \quad (17)$$

Sendo que:

$$M_s > T_q > 80 \quad (18)$$

onde V_γ representa a fração volumétrica de austenita retida, T_q representa a temperatura mais baixa atingida durante a têmpera e M_s é a temperatura de início da transformação martensítica. Além disso, o princípio da aditividade fornece a fração volumétrica da martensita:

$$V_M = 1 - \exp[-1,10 \cdot 10^{-2}(M_s - T_q)] \quad (19)$$

Estas relações foram obtidas de forma empírica (KOISTINEN e MARBURGER, 1959).

2.7 Modelos Numérico-Computacionais, Aplicações e Implementações

De uma maneira geral, observa-se que a modelagem dos fenômenos físicos presentes nos processos de tratamento térmico de aços possuem duas abordagens distintas: microscópica e macroscópica. Muitos modelos trabalham separadamente em uma ou outra abordagem, enquanto que outros tentam relacionar as duas, desenvolvendo as interações e conexões entre ambas.

A abordagem microscópica leva em consideração os aspectos metalúrgicos, como as configurações de cada fase formada, os mecanismos de formação, difusão, crescimento de grãos, etc. Já a abordagem macroscópica possui uma preocupação com os aspectos fenomenológicos, sendo que, segundo Pacheco et al. (2003), a

seguinte classificação pode ser proposta para os modelos que seguem essa linha: modelos polinomiais, modelos com cinética de transformação de fase assumida, modelos com restrições internas e modelos baseados na plasticidade.

Entretanto, ao analisar diferentes modelos propostos na literatura, nota-se que, além dessas classificações e divisões já citadas, faz-se necessário compreender as diferentes abordagens utilizadas na resolução dos problemas térmicos, mecânico e de transformação de fase e no acoplamento entre esses problemas. Dessa forma, pretende-se avaliar os modelos numérico-computacionais já propostos pela literatura, agrupando-os e analisando-os sob a ótica de como os acoplamentos entre os diferentes fenômenos presentes nos processos de tratamentos térmicos são tratados e resolvidos.

2.7.1 Equações acopladas Vs. Equações desacopladas

A simulação numérica de tratamentos térmicos é a área de estudo e trabalho de muitos pesquisadores, que se dedicam ou à análise térmica e mecânica do processo (OLIVEIRA et al., 2001; HARDIN e BECKERMANN, 2005; PACHECO et al., 2001a, 2001b, 2004, 2005, 2007; DENIS et al., 1992; CANALE et al., 2005) ou a aspectos do modelamento do material (BORTOLETO et al., 2008; RISSO et al. 2004; DOBRZANSKI et al., 2004a, 2004b, 2004c, 2007). Alguns modelos descrevem as propriedades dos materiais como funções da temperatura, microestrutura e composição química (PACHECO et al., 2004; BORTOLETO et al., 2008). Outros descrevem a evolução da microestrutura como função do tempo de resfriamento e dos diagramas TTT e CRC para diferentes ligas e composições químicas (RISSO et al. 2004; SARMIENTO, 2004). Um dos elementos cruciais para a correta simulação da evolução termo-mecânica-microestrutural dos aços submetidos a tratamentos térmicos é a capacidade que o modelo de material tem de reportar as variações nas propriedades térmicas e mecânicas devidas às alterações das estruturas metalúrgicas e da temperatura (BORTOLETO, 2008).

Modelos que incorporam o acoplamento mútuo entre fluxo de calor, geração de tensões e transformação de fase foram propostos por autores como Denis et al. (1992), Ganghoffer et al. (1994) e Fletcher (1981), entre outros. Dessa forma, é natural pensar que esse tipo de abordagem permite a obtenção de resultados mais

coerentes com a realidade dos fenômenos analisados e descreve o comportamento dos materiais e processos de forma mais precisa.

Entretanto, o desacoplamento entre os problemas é por vezes utilizado, seja na intenção de facilitar cálculos numéricos, seja com o objetivo de entender plenamente cada problema de forma separada, para, em seguida, analisar suas conexões e influências simultâneas.

Como exemplo, pode-se citar o trabalho de Pacheco et al. (2001a), no qual foi desenvolvido um procedimento numérico baseado na técnica OSP (*Operator splitting techniques*)⁸ com um esquema de interações numéricas no intuito de lidar com as não-linearidades da formulação do problema. Através dessa suposição, o problema foi simplificado, resolvendo-se as equações acopladas por meio da resolução de 4 problemas desacoplados: térmico, de transformação de fase, termo-elástico e de comportamento elasto-plástico. Assim, esses autores analisaram o processo de endurecimento progressivo de um cilindro de aço e simularam o processo de têmpera criando um novo modelo constitutivo baseado na mecânica do contínuo.

De forma análoga, Silva et al. (2001) analisaram as distorções geométricas e/ou formação de trincas que podem tornar uma peça temperada inadequada para utilização e propuseram um modelo anisotérmico com variáveis internas, baseado na termodinâmica dos processos irreversíveis e na mecânica do contínuo, para avaliar as tensões residuais induzida pelo processo de têmpera. Este procedimento também permite que se substitua o problema original, acoplado, em quatro problemas desacoplados: térmico, transformação de fase, termoelástico e elastoplástico.

Coret e Combescure (2002) propuseram um modelo mecânico em que cada fase tem sua própria lei constitutiva e considera de forma independente a plasticidade da transformação de fase, afirmando a necessidade de se considerar os vários mecanismos acoplados que existem no meio dos diferentes carregamentos (térmico, mecânico e metalúrgico). Esses autores consideraram como efeitos de segunda ordem as influências dos efeitos mecânicos sobre os térmicos e os mecânicos sobre os metalúrgicos, uma vez que foi observado que para alguns aços

⁸ A técnica OSP consiste em decompor sistemas e problemas complexos em subproblemas mais simples, tratando cada um individualmente pela utilização de algoritmos numéricos especializados.

a influência do estado de tensão sobre os diagramas de transformação é pequena (conforme cita Denis et al. (1985)). Isso permite a solução do problema termo-metalúrgico independentemente do problema mecânico.

2.7.2 Abordagem estritamente Térmica

Alguns autores, como Reyes et al. (2007) implementaram apenas a análise térmica do problema de têmpera, sem considerar as frações volumétricas das transformações ou a geração de tensões, mas conseguindo estimar valores de dureza superficial.

2.7.3 Abordagem Termo-mecânica

O cálculo acoplado do problema termo-mecânico está disponível na maioria dos programas comerciais de Elementos Finitos, permitindo o cálculo das tensões térmicas elásticas e plásticas. Entretanto, o desacoplamento entre esse dois problemas pode ser realizado sempre que necessário e conveniente, sem prejuízo para os resultados. Ou seja, pode-se, primeiramente, calcular as temperaturas de todos os pontos da peça valendo-se das equações de transferência de calor e, em seguida, com as variações de temperatura calculadas, alimentar os cálculos das tensões térmicas.

Canale et al. (2005) calcularam os coeficientes de troca térmica através do programa HT-Mod, enquanto que as temperaturas, distorções de forma e tensões residuais térmicas correspondentes foram calculadas utilizando-se o programa Abaqus. Os resultados ilustraram os benefícios potenciais da simulação computacional na análise do impacto de diferentes meios de têmpera e condições de aquecimento e resfriamento durante o tratamento térmico.

Já Inoue e Tanaka (1975) utilizaram diagramas de resfriamento contínuo para estimar a mudança de volume devido à transformação de fase para o cálculo de tensões internas.

2.7.4 Abordagem Termo-mecânico-metalúrgica

Roux e Billardon (2007) detalham cada um dos três campos do problema termo-metalúrgico-mecânico e propõem um modelo baseado nessa concepção, assumindo que o estado do material pode ser modelado utilizando-se em conjunto uma formulação em função de potenciais termodinâmicos e uma lei das misturas simples.

Risso et al. (2004) apresentaram um modelo simplificado para previsão de deformações e tensões produzidas durante o tratamento térmico de ligas ferrosas na fabricação de cilindros de laminação, usando o método dos elementos finitos. De um ponto de vista computacional, a resolução de tal problema requer uma análise termo-metalúrgico-mecânica acoplada, modelada como um processo não estacionário e não-linear. As propriedades térmicas dependem da composição microestrutural, logo o cálculo das propriedades metalúrgicas está acoplado diretamente com a análise térmica. As transformações metalúrgicas que ocorrem durante o processo são importantes para o desenvolvimento de tensões internas e distorções, devido à alteração das propriedades mecânicas do metal, mas também envolvem alterações no volume específico, que estão acopladas às dilatações térmicas. Para um dado material, suas propriedades podem ser consideradas como funções da temperatura e composição da microestrutura e, em segunda análise, como função da temperatura e tempo. Assim, Risso et al. (2004) usaram aproximações de um diagrama TTT, definindo parâmetros de material, e construíram um mapa de microestrutura como função da temperatura e do tempo, usando informações dos ciclos de aquecimento e resfriamento e diagramas TTT isotérmicos ou CRC para o intervalo de tempera, para, então, mapearem as propriedades térmicas e mecânicas segundo as fases.

De forma análoga ao tratar o comportamento dos materiais, Wang et al. (1997) desenvolveram um modelo em elementos finitos que inclui a descrição das transformações austenita-perlita e austenita-martensita em aços carbono, admitindo propriedades do material em função da temperatura e uma análise de tensões elasto-plásticas. Um estudo experimental foi realizado comparando-se os diferentes meios de têmpera.

Lauro e Sarmiento (2002) consideraram a variação do coeficiente de transferência de calor do meio de têmpera, a condutividade térmica e o calor

específico em função da temperatura, além de modelar a geração de calor devido às transformações de fase. Em termos mecânicos, consideraram a variação de volume para cada ponto da peça como dependente da temperatura e da microestrutura desse ponto, levando em conta, ainda, a variação do limite de escoamento do material em função da microestrutura e da temperatura. Para tanto, fizeram uso do software Abaqus 6.2-1 acoplado a sub-rotinas em linguagem FORTRAN. Entretanto, seus cálculos consideram apenas transformações isotérmicas.

Melander (1985a, 1985b) apresentou modelos, válidos para geometrias cilíndricas, que podem ser usados para o cálculo da entrada de energia no material, campos de temperatura e transformações de fase durante o aquecimento e resfriamento da superfície da peça tratada, além de níveis de dureza, distribuição de tensões residuais e relações entre estas diferentes quantidades.

Woodard et al. (1999) desenvolveram um procedimento com o método dos elementos finitos para a análise de temperatura e microestrutura dos problemas de têmpera envolvendo transformações de fase não isotérmicas. A análise em elementos finitos incorporou propriedades de material dependentes da variação de temperatura e usou diagramas TTT para descrever a evolução microestrutural nos aços, além de estimar a liberação de calor latente durante a mudança de fase. Este procedimento foi aplicado para calcular temperatura, microestrutura e distribuição de durezas em um cilindro em aço SAE 1080 temperado em água e em dois outros meios de têmpera. Foi descoberto que, quando o calor latente não é considerado nos cálculos, as frações volumétricas de perlita e martensita obtidas pelo cálculo são diferentes em quase uma ordem de grandeza dos valores calculados considerando-se o calor latente na formulação. Por fim, analisou-se a têmpera em água de cilindros de diâmetros entre 38 mm e 380 mm, de aço SAE 1080, para se mostrar o efeito não-linear do diâmetro do cilindro nas temperaturas e microestruturas.

2.7.5 Cálculo das frações volumétricas transformadas

Alguns autores não calculam as frações parciais obtidas em transformações difusionais por desconsiderarem a influência destas sobre as características termomecânicas dos materiais (ARGYRIS et al., 1985).

Teixeira (2002) sugere um novo modelo para o cálculo das frações transformadas de perlita e bainita, levando em consideração tanto a temperatura quanto a derivada desta em relação ao tempo, abordando o cálculo das frações parciais de constituintes resultantes de transformações difusionais em aços ao carbono e apresenta o resultado de uma análise por elementos finitos do problema termo-estrutural de uma peça submetida à têmpera, admitindo a formação de martensita, perlita e bainita. Teixeira (2002) desenvolveu códigos computacionais orientados a objetos para análise térmica não-linear acoplada à análise da microestrutura. Códigos também foram criados para análise elasto-plástica, onde a distribuição de temperatura e as frações parciais dos constituintes são dados de entrada. As propriedades termo-mecânicas do material são consideradas dependentes tanto da temperatura quanto da fração parcial de cada constituinte. No tratamento térmico foi considerada a formação de martensita segundo o esquema de Koistinen & Marburger. Esse autor abordou, também, a formação difusional de perlita e bainita, segundo o esquema proposto por Avrami. Por fim, apresentou um novo modelo para calcular os parâmetros cinéticos das transformações difusionais austenita-perlita e austenita-bainita.

Leblond et al. (1984, 1986, 1989) propõem um novo modelo cinético para transformações metalúrgicas anisotérmicas⁹, válidos para difusão controlada, bem como para transformação martensítica, descrevendo-o primeiro para o caso de duas fases e uma única transformação e então o estendendo para o caso de n fases e várias transformações (e ainda com a possibilidade de transformações simultâneas). O efeito do tamanho de grão da austenita também pôde ser incluído, sendo necessária uma equação da evolução do tamanho de grão da austenita. Leblond et al. (1984, 1986, 1989) mostram que a equação clássica é limitada para os casos de proporção constante de austenita, e propõe uma extensão razoável da equação clássica para um caso geral.

Peultier et al. (2004) utilizaram o programa de elementos finitos Abaqus e a sub-rotina UMAT (que permite ao usuário implementar um modelo customizado de comportamento do material no próprio Abaqus) para propor um modelo macroscópico para a transformação martensítica, baseado na análise micro-

⁹ Anisotérmicas – que não está no equilíbrio térmico ou na mesma temperatura

mecânica das transformações de fase envolvendo duas variáveis macroscópicas: a fração volumétrica de martensita e deformação média da fase martensítica.

Um trabalho semelhante foi realizado por Long (2001), que utilizou o programa Abaqus e sub-rotinas Fortran para modelar transformações de fase. Sarmiento (2004) também utilizou o conjunto Abaqus e sub-rotinas para o modelamento de transformações de fase em aços, mas seu modelo admite transformações isotérmicas e sua extrapolação para tratamentos não-isotérmicos ou mesmo de resfriamento contínuo não pode ser generalizada.

Figura 15 – Diagrama TTT esquemático e curva de resfriamento simplificada em isotermas para facilitar o cálculo do crescimento das fases

Nos estudos de Kang e Im (2007), uma investigação numérica usando-se modelamento tridimensional em elementos finitos foi realizada para simular os processos de cementação e transformação de fase durante a têmpera de aços. Para a simulação das transformações de fase difusionais durante o processo de têmpera não isotérmico, os autores subdividiram a curva de resfriamento em vários passos isotérmicos a fim de ajudar a interpolação entre as curvas de resfriamento e os diagramas de transformação (conforme ilustra a Figura 15). Resolveu-se, ainda, a

equação de Johnson–Mehl–Avrami–Kolmogorov (JMAK), enquanto a equação de Koistinen e Marburger foi usada para modelar as transformações sem difusão. Os resultados numéricos foram similares aos encontrados na literatura.

Denis et al. (1992) apresentaram um modelo matemático para descrever as transformações de fase durante o aquecimento e resfriamento contínuo de aços, numa tentativa de contabilizar o efeito da porcentagem de carbono na austenita e o efeito do tamanho do grão austenítico na cinética das transformações de fase.

2.7.6 Cálculo e Predição de Curvas de Transformação

Dobrzanski et al. (2004a, 2004b, 2004c, 2007) aplicaram os conceitos e cálculos de redes neurais para avaliar a influência da composição química e da temperatura de austenitização na forma de curvas CRC, além de obter expressões matemáticas para as temperaturas e tempos mais relevantes presentes nos diagramas de transformação.

Dudás (2007) apresentou o desenvolvimento de um modelo capaz de realizar cálculos suficientemente precisos dos diagramas TTT e CRC de um aço 42 CrMo4 e comparou seus resultados obtidos pelo modelamento com resultados experimentais, mostrando que é possível a predição detalhada de diagramas de transformação.

2.8 Modelos para estimativa de Dureza Vickers

A dureza em qualquer ponto de um material pode ser calculada usando-se a lei das misturas, uma vez conhecidas as frações volumétricas de ferrita, perlita, martensita e austenita retida:

$$H = H_M X_M + H_B X_B + H_{AFP} X_{AFP} \quad (20)$$

Onde, H , H_M , H_B , H_{AFP} representam, respectivamente, a dureza total, a dureza da martensita, da bainita e a dureza da austenita, ferrita e perlita. X_M , X_B e X_{AFP} são as frações volumétricas de martensita, bainita e da soma entre austenita, ferrita e perlita, respectivamente.

Fórmulas baseadas empiricamente foram desenvolvidas por Maynier et al. (1978) e podem ser utilizadas em estudos para o cálculo da dureza Vickers de cada fase em diferentes taxas de resfriamento. As estimativas desses valores de dureza foram baseadas em resultados do cálculo de temperaturas, da microestrutura e da composição química do material, e as expressões levam em consideração a porcentagem em massa referente a cada elemento:

$$H_{VM} = 127 + 949C + 27Si + 11Mn + 8Ni + 16Cr + 21\log V_r \quad (21)$$

$$H_{VB} = -323 + 185C + 330Si + 153Mn + 65Ni + 144Cr + 191Mo + (89 + 53C - 55Si - 22Mn - 10Ni - 20Cr - 33Mo)\log V_r \quad (22)$$

$$H_{VF+P+A} = 42 + 223C + 53Si + 30Mn + 12,6Ni + 7Cr + 19Mo + (10 - 19Si + 4Ni + 8Cr + 130V)\log V_r \quad (23)$$

Onde H_{VM} e H_{VB} representam, respectivamente, a dureza Vickers da martensita e da bainita e $H_{V(F+P+A)}$, indicam a dureza Vickers relativa à ferrita, perlita e austenita. V_r é a taxa de resfriamento a 700°C em °C/hora e pode ser obtida a partir do intervalo de temperaturas entre 800°C e 500°C:

$$V_r = \left(\frac{800 - 500}{\tau_{\frac{8}{5}}} \right) \left(\frac{1}{3600} \right) \quad (24)$$

O valor de $\tau_{8/5}$ pode ser medido experimentalmente, calculado via Método dos Elementos Finitos ou pela expressão de Adams:

$$\tau_{\frac{8}{5}} = \frac{\frac{q}{v}}{2\pi k} \left(\frac{1}{500 - T_0} - \frac{1}{800 - T_0} \right) \quad (25)$$

Onde T_0 é a temperatura ambiente, k é a condutividade térmica (J/ms°C) e q/v é o calor incidente/entrante (J/m). A dureza total do material é, então, calculada utilizando-se a lei das misturas:

$$H_V = \sum_{n=1}^k (H_{V_k} x X_k) \quad k = A, F, P, B, M \quad (26)$$

Maynier et al. (1978) apontam, ainda, que os valores de dureza são mais sensíveis em relação à fração volumétrica de martensita.

Os valores resultantes de dureza Vickers podem, ainda, ser transformados em dureza Rockwell segundo tabelas de conversão. Entretanto é importante ressaltar que as relações de Maynier têm sua aplicação limitada aos aços baixo carbono, dentro das seguintes faixas de composição:

$$0,1\% < C < 0,5\%, Si < 1\%, Mn < 2\%, Ni < 4\%, Mo < 1\%, Cr < 3\%, V < 0,2\%, Cu < 0,5\%, Mn + Ni + Mo < 5\% \text{ e } 0,01\% < Al < 0,05\%$$

2.9 Tensão Residual

Em sua definição, tensão residual é toda a tensão a que um material ou corpo está submetido quando livre de carregamento, ou seja, são os esforços internos ao material, auto-equilibrados. Em materiais metálicos, são frequentemente decorrentes de algum gradiente de deformação plástica (LU, 1996; BOAG et al. 2002; SERANTONI, 2003) a que este material foi submetido. Dessa forma, as tensões residuais atuam no corpo sem necessidade de uma aplicação de um esforço externo e podem se originar de inúmeros processos.

No tratamento térmico de aços, as variações de temperatura impostas ao material geram gradientes térmicos e, conseqüentemente, tensões residuais que podem, por sua vez, gerar trincas dependendo da sua concentração e orientação (Stevens et al., 1971). A tensão residual gerada nos tratamentos térmicos pode ser provocada por dois fenômenos:

Em um primeiro, a diferença de temperatura entre o centro e a superfície do componente gera tensões. Desse modo, considerando o aquecimento de um cilindro feito a partir de sua superfície, sabe-se que, no início, sua superfície tentará se expandir mais que o centro, mais frio, deixando esse último sob tensões trativas. No resfriamento ocorreria o contrário. A superfície, mais fria, se comprimiria enquanto o

centro, ainda aquecido, tentaria permanecer com suas dimensões inalteradas. As tensões residuais, nesse caso exclusivamente térmicas, aparecem quando, ao longo do processo de resfriamento, há diferenças de deformação plástica em diferentes pontos do cilindro (MELANDER, 1985a, 1985b).

O segundo fenômeno é relativo às variações no instante e na localização de transformações de fase, que, no caso dos aços e outros materiais com estados alotrópicos, podem igualmente resultar em tensões residuais no cilindro, devido às diferentes taxas de variação volumétrica de cada fase transformada.

Como ocorrem diferentes transformações de fase em diferentes regiões do cilindro e em diferentes instantes de tempo, tensões residuais são originadas e resultam em uma variação no comportamento das propriedades térmicas e mecânicas do material, de acordo com o produto de cada transformação (CAMARÃO, PACHECO e SAVI, 2004). Segundo Stevens et. al (1971), durante o resfriamento de um cilindro, o material da superfície, que se resfria primeiramente, pode sofrer transformação de fase, necessariamente acompanhada de uma expansão volumétrica. O centro, que ainda está a uma temperatura ainda elevada, apresenta baixo limite de escoamento e se deforma plasticamente aliviando, ao menos em parte, as tensões oriundas da transformação.

Essas tensões originadas na transformação de fase devem ser analisadas conjuntamente com as tensões causadas pela diferença entre as taxas de resfriamento do centro e da superfície do cilindro.

Oliveira, Zoby e Souza (2001) e Sem (2000) trazem estudos sobre tensões em cilindros, sem considerar a transformação de fase do material, e também abordaram o problema através da construção de modelos matemáticos e computacionais. A partir do artigo de Pacheco et al. (2001a, 2001b, 2004, 2005, 2007) pode-se conhecer resultados já obtidos a respeito dos comportamentos teórico e modelado das tensões residuais térmicas e por transformação de fase. Melander (1985a, 1985b) traz uma série de trabalhos que analisam a geração de tensões nos processos de endurecimento de aços, analisando equações que regem as tensões desenvolvidas num corpo cilíndrico.

Ebert (1978) apresenta um estudo sobre o comportamento das tensões residuais em processos de têmpera de aços cementados e considera separadamente as fontes de geração de tensão residual térmica por resfriamento e por transformação de fase. A Figura 16 traz um esquema ilustrativo do

comportamento das tensões ao longo do diâmetro de um cilindro, sem considerar o efeito das transformações de fase.

Pode-se observar que, no final do processo de resfriamento, a região superficial do cilindro pode encontrar-se sob ação de tensões compressivas, enquanto que o centro pode ficar submetido a tensões trativas na direção axial, como visto nos cantos inferior esquerdo e direito da Figura 16. No canto superior esquerdo, pode-se notar, também, a evolução do comportamento de temperatura e tensões residuais no tempo, para centro e superfície, em função da temperatura, segundo os instantes A, B, C e D.

Figura 16 – Comportamento da tensão residual ao longo do diâmetro do cilindro, segundo o estudo de Ebert¹⁹, sem considerar a transformação de fase do material, ou seja, tensões exclusivamente térmicas.

A Figura 17, também obtida a partir de Ebert (1978), traz o comportamento das tensões quando se considera o fenômeno de transformação de fase em um cilindro de diâmetro d , que é resfriado por têmpera a partir de sua superfície. Na parte superior esquerda da Figura 17 pode-se observar que a curva de resfriamento da superfície intercepta a curva TTT do aço na linha M_s , havendo formação de martensita. Ao contrário, a curva de resfriamento para o centro atinge o cotovelo da

curva TTT para uma outra transformação, não chegando à linha M_s , e com isso o centro pode se transformar em outras estruturas que não a martensita, ou ainda, ficar parcialmente sob a forma de austenita, sem transformação.

Pelo exposto acima, pode-se notar que os comportamentos previstos teoricamente para as tensões num cilindro são diferentes para cada caso considerado, de modo que ao analisar uma situação real, deve-se esperar uma combinação entre ao comportamento previsto pela Figura 16 e Figura 17, ou seja, a sobreposição entre os efeitos térmicos e os de transformação de fase. Quando se considera a transformação de fase do material, a superfície pode ficar sob tração e o centro sob compressão, contrariamente ao que pode ocorrer quando não se examina a influência da transformação de fase.

Figura 17 – Comportamento da tensão residual ao longo do diâmetro do cilindro, segundo o estudo de Ebert (1978), considerando apenas o efeito da transformação de fase do material (desconsideram-se tensões térmicas).

Inoue e Tanaka (1975), diferente das análises descritas nos parágrafos anteriores, indicam que 3 tipos de tensão são induzidas nos materiais pelo processo de têmpera: (1) tensões térmicas devidas à contração térmica e que dependem da distribuição de temperaturas, (2) tensões de transformação de fase devidas à

expansão volumétrica durante a transformação e (3) tensões causadas pela diferença de densidades entre as estruturas formadas após as mudanças de fase. Os dois pesquisadores propuseram uma formulação em elementos finitos com uma análise elasto-plástica da operação de têmpera, considerando as transformações de fase e descrevendo-as usando um coeficiente de expansão térmica que depende da temperatura e da taxa de resfriamento. A relação para cálculo das tensões e deformações incrementais inclui termos relativos à têmpera e pelo uso das equações de equilíbrio, Inoue e Tanaka (1975) conseguiram estabelecer um entendimento mais claro sobre o efeito das transformações. Para exemplificar a teoria formulada, o cálculo da têmpera de um cilindro de 60 mm de diâmetro foi realizado, considerando um aço com 0,43% de carbono, gerando resultados de tensões que concordaram bem com valores experimentais, como pode ser verificado na Figura 18.

Figura 18 – Distribuição de tensão residual em geometria cilíndrica. Adaptado de: Inoue e Tanaka (1975)

2.10 Método dos Elementos Finitos (MEF)

O método dos elementos finitos é um dos métodos numéricos mais utilizados para resolução de problemas da mecânica do contínuo, pela modelagem feita através de equações diferenciais parciais ou equações integrais, com suas respectivas condições de contorno. A concepção do método consiste na divisão do domínio de integração, contínuo, em um número finito de pequenas regiões denominadas de elementos finitos, que são interligados através de seus nós. A essa divisão do domínio dá-se o nome de malha ou rede de elementos finitos. Assim, o Método dos elementos Finitos consiste na divisão do domínio de integração em um número finito de pequenas regiões (elementos), transformando o contínuo em discreto.

A solução obtida via método dos elementos finitos é tão mais precisa quanto mais refinada for a malha de elementos finitos e maior o número de nós. A discretização do modelo deve ser realizada visando uma solução satisfatória dentro da precisão desejada e do tempo esperado.

No MEF, ao invés de se buscar uma função admissível que satisfaça as condições de contorno para todo o domínio do problema, as funções admissíveis são definidas no domínio de cada elemento finito. Assim, para cada elemento finito é atribuído um funcional que, somado aos dos demais elementos finitos, formam o funcional para todo o domínio. A função aproximadora que representa a solução dentro de cada elemento (ou subdomínio) deve conter coeficientes não conhecidos que serão determinados de forma a minimizar o erro na solução. A função aproximadora de cada elemento finito é formada por variáveis referidas aos nós do elemento (parâmetros nodais) e por funções de interpolação, também denominadas de funções de forma.

Em uma análise que envolve não linearidades, a solução não é calculada pela resolução de equações lineares, como é feito para um problema linear. Ao contrário, obtém a solução especificando-se o carregamento (térmico, mecânico, etc) como função do tempo e incrementando o tempo para obter a resposta não-linear. Assim, o programa de elementos finitos divide a simulação em determinado número de incrementos e encontra a configuração aproximada de equilíbrio no final de cada incremento de tempo.

OBJETIVOS

Grande parte das abordagens científicas enfrenta problemas no que se refere à modelagem numérica. Modelos matemáticos e numéricos são, geralmente, baseados em observações e em algumas hipóteses ou suposições, numa tentativa de compreender qualitativa e quantitativamente alguns aspectos de uma realidade infinitamente variada. Tentativas anteriores de integração em um modelo unificado de todas as transformações de fase que ocorrem nos aços passaram por vários graus de empirismo e nenhum desses modelos conseguiu se difundir entre usuários e pesquisadores e, geralmente, sua aplicabilidade se restringe a determinadas composições químicas ou classes de aços.

O objetivo deste trabalho foi desenvolver um novo modelo numérico computacional para análise do problema termo-mecânico-microestrutural no tratamento térmico de aços que simule a geração de tensões residuais, térmicas e de transformação de fase, nos processos de têmpera. Para isso, foram utilizados o software de elementos finitos Abaqus, para os cálculos térmicos e mecânicos, e rotinas escritas em linguagem FORTRAN, que implementam os cálculos do modelo de transformação de fase, expansão volumétrica, geração de calor, alteração de propriedades mecânicas e outros fenômenos metalúrgicos.

Objetiva-se reunir, nesse novo modelo proposto, as principais vantagens dos diferentes modelos e formulações já propostos na literatura para o estudo dos tratamentos térmicos, em especial do processo de têmpera, de modo a unificar essas diferentes abordagens permitindo o cálculo e predição de variáveis de interesse, como as tensões térmicas e de transformação de fase e as frações de cada fase na microestrutura do aço após tratamento. Deve-se, ainda, ser possível acompanhar as frações de cada fase conforme a microestrutura evolui.

Espera-se, ainda, que o modelo proposto concorde com os modelos teóricos e experimentais já desenvolvidos e divulgados na literatura, considerando os principais mecanismos de geração de tensões residuais, segundo o problema termo-mecânico-microestrutural acoplado.

Além disso, pretende-se validar experimentalmente o modelo proposto, por meio de ensaios de temperabilidade Jominy modificados e instrumentados. Esses ensaios permitem a avaliação das microestruturas formadas, a medição dos níveis

de dureza do material e das distorções geométricas geradas pelo tratamento térmico, de forma a permitir a comparação desses valores aos obtidos pelos cálculos das simulações computacionais.

MATERIAIS E MÉTODOS

O desenvolvimento e a organização dos Materiais e Métodos e Resultados deste trabalho foram divididos em duas etapas. Inicialmente, apresentam-se os modelos numéricos computacionais desenvolvidos para o cálculo das tensões e transformações de fase geradas em um processo de têmpera.

As propriedades termomecânicas do material foram consideradas dependentes tanto da temperatura quanto da fração parcial de cada constituinte. No tratamento térmico, foi considerada a formação de martensita segundo o esquema de Koistinen & Marburger (1959) e para as transformações difusionais, não se fez uso do modelo JMAK (Avrami, 1939), pois esse tem sua aplicação limitada a transformações isotérmicas. Em seu lugar, utilizou-se a sobreposição, seguida de interpolação, entre as curvas de resfriamento da peça e a curva CRC do material.

Considerou-se, durante a transformação, além das deformações térmica, elástica e plástica, a deformação devida às transformações de fase.

Em uma segunda etapa deste trabalho, a fim de promover a validação experimental do modelo computacional proposto, descreve-se a concepção de um ensaio Jominy modificado e instrumentado, cuja análise dos resultados obtidos permitiu realizar a comparação entre os resultados calculados (microestrutura, dureza, distorções e tensões).

4.1 Modelamento Computacional Por Elementos Finitos

Uma série de simulações pelo modelamento por elementos finitos foi conduzida para que o fenômeno de transformação de fase dos aços fosse compreendido. As simulações são um esforço para se reproduzir os resultados da literatura, em especial os provenientes das pesquisas de Pacheco et al. (2001a, 2001b, 2004, 2005, 2007), Risso et al. (2004) e Sarmiento et al. (2002, 2004, 2005).

O modelo desenvolvido neste trabalho apresenta algumas similaridades com os trabalhos desses pesquisadores, agrupando suas diferentes técnicas de forma a unificar as três abordagens em uma nova proposta para o cálculo das frações transformadas em fenômenos difusionais e das tensões residuais oriundas dos processos de tratamentos térmicos. Além disso, acrescenta-se e amplia-se a

abrangência do modelo, visto que a formulação considera transformações ocorrendo sob o resfriamento contínuo e não mais isotérmicas como fazem os trabalhos citados. Consideram-se as propriedades térmicas e mecânicas do aço SAE 4140 conforme apresentadas por Pacheco et al. (2001a). Entretanto, acrescentam-se as informações obtidas de Bhadeshia (2002), de forma a diferenciar as propriedades térmicas e mecânicas de cada microconstituente. Nos modelos admitiu-se que os materiais tratados termicamente têm um estado inicial livre de tensões e deformações e não foram considerados os fenômenos de plasticidade induzida por transformação.

Os conceitos de sobreposição das curvas de transformação CCT com as curvas de resfriamento do material são semelhantes aos de Risso et al. (2004) e Sarmiento (2004), de forma a simplificar o modo de simular as transformações de fase. Contudo, acrescentou-se a possibilidade de considerar uma interpolação sobre as curvas de resfriamento contínuo, ampliando a abrangência do modelo, visto que Risso et al. (2004) e Sarmiento (2004) utilizam uma interpolação linear sobre as curvas de resfriamento isotérmico.

4.1.1 Implementação de algoritmos e sub-rotinas de usuário no programa Abaqus

O programa Abaqus fornece ao usuário a possibilidade de programar as leis de comportamento mecânico e térmico por intermédio de rotinas em linguagem FORTRAN, de modo a estender as funcionalidades do programa e possibilidades de simulação. Essas sub-rotinas de usuário específicas podem ser desenvolvidas, programadas e, posteriormente, executadas junta e paralelamente aos cálculos do Abaqus. Isso exige um esforço considerável no desenvolvimento de subprogramas efetivos, escritos de acordo com regras de sintaxe definidas na documentação do software, que alteram os modelos matemáticos utilizados para os cálculos numéricos.

Dessa forma, é possível ao usuário alterar as formulações e algumas equações constitutivas de forma a modificar a maneira como se resolvem os cálculos para os problemas modelados. O usuário pode, ainda, implementar

formulações próprias. Essas sub-rotinas são executadas para todos os elementos da malha de elementos finitos e a cada novo incremento de tempo.

Existe um nome específico que deve ser dado a cada sub-rotina desenvolvida, de modo que o programa Abaqus possa reconhecer e identificar qual o tipo de alteração que o usuário deseja introduzir ao modelo e aos cálculos. Desenvolvido o modelo matemático a ser implementado, é recomendado depurar as sub-rotinas de usuário em uma malha de um único elemento, antes de aplicar a modificação a toda a análise.

Para o modelo desenvolvido neste trabalho, as sub-rotinas UVARM, USDFLD, UMATHT, UEXPAN, UHARD e SDVINI foram utilizadas.

A sub-rotina UVARM (User VArIable Return Method) é usada para se criar novas variáveis de saída no Abaqus, ou seja, variáveis que armazenam os dados processados e calculados pelo programa.

A sub-rotina USDFLD (USer Defined FieLD) permite ao usuário acessar os valores de variáveis de interesse em qualquer outra sub-rotina através da criação de variáveis de estado. Ou seja, permite a troca de informações entre as diversas sub-rotinas utilizadas em um modelo.

Já a sub-rotina UMATHT (User MATerial HeaT) possibilita ao usuário programar a lei do comportamento térmico do material estudado. Para tanto, é necessário definir no código implementado uma energia livre e um potencial de dissipação que satisfaça completamente a segunda lei da termodinâmica, escolhendo uma expressão para a energia livre, ou seja, definindo uma energia térmica interna. Assim, em UMATHT, é necessário fornecer as expressões da energia térmica interna por unidade de massa, a sua variação em relação à temperatura e gradiente de temperatura. Com isso, é possível, ainda, alterar as propriedades térmicas do material (condutividade térmica e calor específico), colocando-as em função das fases transformadas, da temperatura ou de qualquer outra variável, indicar a geração de calor interno, ou produção volumétrica de calor (calor latente), bem como, o vetor do fluxo de calor, suas derivadas para definir o comportamento térmico do problema. A partir destes dados, o Abaqus é responsável por reconstruir a equação de equilíbrio térmico, resolvê-la e calcular a temperatura em toda a estrutura.

A sub-rotina UEXPAN (User EXPANsion) é implementada na intenção de se alterar o cálculo da expansão volumétrica do material. Enquanto que a utilização da sub-rotina UHARD (User HARDening) permite ao usuário adicionar uma expressão para recalculer o valor da tensão do escoamento do material em função de quaisquer outras variáveis.

Por fim, a sub-rotina SDVINI (Solution-Dependent INItial Variables) é utilizada para definir os valores iniciais das variáveis de estado criadas pela sub-rotina USDFLD, de modo a garantir um sistema mais robusto e menos sujeito a problemas nos cálculos implementados.

4.1.2 Primeira Abordagem (Proposta 1)

Em uma primeira aproximação, não se analisou, diretamente, o acoplamento entre os problemas térmico, mecânico e metalúrgico no processo de têmpera. No lugar, fez-se uso de uma abordagem que considera apenas os efeitos da expansão volumétrica das transformações de fase sobre as tensões residuais. Em outras palavras, avaliou-se o efeito térmico sobre a microestrutura e o desta sobre as tensões no material, além das tensões térmicas, desconsiderando-se outras interações, como ilustra a Figura 19.

Foram simulados os processos de têmpera de um cilindro de diâmetro igual a 45 mm e 180 mm de comprimento, idêntico à geometria do trabalho de Pacheco et al. (2007), que analisou uma têmpera por indução, de modo que a extração de calor nessa primeira abordagem ocorre predominantemente na direção radial do cilindro, ainda que haja uma parcela de condução de calor na direção longitudinal (devido às perdas pela convecção nos extremos da barra cilíndrica).

Esse problema foi analisado sob a óptica de 4 modelos diferentes, considerando-se as seguintes transformações de fase: 1a) transformação martensítica parcial, 1b) transformação martensítica total, 2) transformação martensítica + transformação perlítica 3) todas as transformações (martensítica, ferrítica, bainítica e perlítica). A diferença entre estes quatro modelos está na forma como cada um simplifica os diagramas CRC e TTT utilizados sobrepostos às curvas de resfriamento do material.

Figura 19 – Acoplamento entre fenômenos considerado pela Proposta 1

O primeiro modelo, dividido em 2 abordagens, considera apenas os efeitos da transformação martensítica, avaliando uma transformação parcial (Modelo 1a) e a transformação total (Modelo 1b), enquanto o Modelo 2 incorpora a transformação austenita-perlita, considerando que esta transformação ocorre para taxas de resfriamento menores que o limite de transformação martensítica. O Modelo 3 calcula a expansão volumétrica de todas as microestruturas resultantes da têmpera (ferrita, bainita, perlita e martensita). Todos os 4 modelos são implementados por meio de sub-rotinas FORTRAN e do programa de elementos finitos Abaqus. Dependendo de como se der a interceptação entre as curvas de transformação e as curvas de resfriamento, a sub-rotina altera o coeficiente de expansão térmica e, conseqüentemente, afeta o cálculo da expansão volumétrica, das deformações plásticas e das tensões.

4.1.2.1 Materiais

Neste trabalho, os processos de tratamento térmico foram simulados utilizando-se as propriedades de material em função da temperatura. As equações 10 a 15 apresentam as propriedades térmicas e mecânicas do aço SAE 4140 e foram obtidas dos trabalhos de Melander (1985a, 1985b), Hildenwall (1979) e Pacheco et al.(2001a). Admite-se que os módulos de elasticidade da ferrita, bainita e perlita seguem a expressão para E_A apresentada na equação 10. O módulo de plasticidade, indicado na equação 12, representa a inclinação da parte plástica da

curva tensão-deformação, que é admitida linear para esse problema. As equações consideram os valores de temperatura em Kelvin.

A Tabela 4 complementa as equações 10 a 15, apresentando outras propriedades disponíveis na literatura (MELANDER, 1985a, 1985b; DOBRZANSKI, 2004a, 2004b, 2004c, 2007; HILDENWALL, 1979; ATKINS, 1980; ASM, 1977). Adicionalmente, a Tabela 5 apresenta a composição química do aço SAE 4140 e a Tabela 6 mostra as expressões para o cálculo dos valores de expansão volumétrica para cada transformação de fase como uma função da quantidade de carbono e os valores para o aço SAE 4140.

Tabela 4 – Outras propriedades do aço SAE4140

$\alpha_T=22,3 \mu\text{m}/(\text{m}^\circ\text{C})$	$M_s=410^\circ\text{C}$	$B_s=532^\circ\text{C}$	$T_F=7 \text{ s}$
$\rho=7800 \text{ kg/cm}^3$	$M_f=300^\circ\text{C}$	$P_s=650^\circ\text{C}$	$T_B=10 \text{ s}$
$v=0,3$	$F_s=710^\circ\text{C}$	$T_A=900^\circ\text{C}$	$T_P=100 \text{ s}$

A composição química do aço SAE 4140 foi utilizada para calcular os valores de temperatura de início (M_s) e de fim (M_f) da transformação martensítica, as temperaturas de início das transformações ferrítica (F_s), bainítica (B_s) e perlítica (P_s), além dos tempos de início das transformações bainítica (T_B), ferrítica (T_F) e perlítica (T_P), utilizando-se o modelo de Trzaska e Dobrzanski (2004a, 2004b, 2004c, 2007). T_A é a temperaturas de austenitização do aço SAE 4140.

Tabela 5 – Composição química nominal do aço SAE 4140. Adaptada de Atkins (1980).

C	0,40
Si	0,20
Mn	0,85
P	0,02
S	0,02
Cr	1,05
Mo	0,30

O diagrama CRC do aço SAE 4140, utilizado em conjunto com as expressões de Trzaska e Dobrzanski (2004a, 2004b, 2004c, 2007) para a construção do modelo, é mostrado na Figura 20. As informações obtidas a partir

desse diagrama foram confrontadas com as propriedades provenientes das equações de Trzaska e Dobrzanski (2004a, 2004b, 2004c, 2007) e os valores selecionados, presentes na Tabela 4, foram utilizados com parâmetros de entrada das sub-rotinas FORTRAN.

Tabela 6 – Expressões para a expansão volumétrica de cada transformação em função da porcentagem de carbono e valores para o aço SAE 4140. Adapt. de Gozzi (2005) e Totten e Howes (1997)

Transformação de Fase	Expansão Volumétrica	Expansão Volumétrica para o aço SAE 4140(%)
Austenita → Martensita	$4,64 + 0,53.(\%C)$	4,428
Austenita → Bainita inferior	$4,64 - 1,43.(\%C)$	4,068
Austenita → Bainita superior	$4,64 - 2,21.(\%C)$	3,756
Austenita → Perlita	$4,64 - 2,21.(\%C)$	3,756
Austenita → Ferrita	$4,64 - 2,21.(\%C)$	3,756

Figura 20 – Diagrama de resfriamento contínuo do aço SAE 4140 utilizado para a construção do modelo MEF e das sub-rotinas FORTRAN. Adaptado de ASM (1977)

4.1.2.2 Métodos

O coeficiente de expansão térmica foi definido como função da temperatura e do tempo, através da sobreposição entre uma simplificação do diagrama CRC e as curvas de resfriamento do material calculadas pelo software Abaqus. Assim, uma região do diagrama de transformação foi definida para cada uma das possíveis microestruturas do material (austenita, martensita, perlita, bainita ou ferrita) e uma sub-rotina em linguagem Fortran fornece ao programa de elementos finitos Abaqus o valor de expansão térmica associado à respectiva transformação sofrida pela austenita. Esse valor de expansão térmica é negativo durante a transformação de fase, visto que há uma expansão volumétrica com a transformação da austenita.

Entretanto, é importante perceber que utilizar o coeficiente de expansão linear negativo foi apenas um artifício computacional para informar ao programa de Elementos Finitos que ocorre uma expansão volumétrica na transformação de fase.

Figura 21 – Diagramas de transformação de fase simplificados para cada um dos modelos desenvolvidos pelas sub-rotinas em FORTRAN.

Foram propostos 4 modelos iniciais, nos quais a curva CRC do material foi simplificada de diferentes formas, como pode ser observado na Figura 21. Cada simplificação foi feita com o intuito de simular todas as alterações de fase juntas e individualmente, de forma a entender o efeito de cada uma separadamente. No primeiro modelo (1a), o diagrama de transformação foi intencionalmente simplificado

para considerar apenas a transformação austenita-martensita. O Modelo 1a difere do Modelo 1b na forma como considera a transformação martensítica. No modelo 1a, um tempo limite foi imposto para o fim da transformação de fase, enquanto que no modelo 1b não há esse limite. Com isso, pelo Modelo 1a, nenhuma transformação ocorre se a curva de resfriamento alcançar o valor M_s depois do tempo limite e haverá uma mistura martensita e austenita retida na microestrutura final. No Modelo 1b, a transformação austenita-martensita foi incluída ao diagrama CRC para todos os instantes de tempo, de forma que toda a estrutura final será martensítica.

Os demais modelos implementam as transformações nos demais microconstituintes, gerados pelas diferenças nas curvas de resfriamento do núcleo e da superfície do cilindro. No modelo 2, a transformação austenita-perlita foi incorporada ao diagrama CRC simplificado utilizado no Modelo 1a e considerou-se que esta transformação ocorre para taxas de resfriamento inferiores ao limite para a transformação martensítica. O Modelo 3 inclui informações de todos os diagramas de transformação do aço SAE 4140 em um código FORTRAN e calcula todas as microestruturas resultantes do processo de têmpera (ferrita, perlita, bainita e martensita), dependendo da taxa de resfriamento.

Figura 22 – Malha de Elementos Finitos utilizada representando metade da seção axial do cilindro (à esquerda) e variação da temperatura na superfície do cilindro (à direita).

O modelo computacional gerado consiste em uma malha bidimensional que representa um quarto da seção transversal da geometria referente a uma barra cilíndrica de 45 mm diâmetro e 180 mm de comprimento, sendo que, para a representação e o equacionamento do sistema, adotou-se o estado de tensões axissimétrico. No método desenvolvido, a malha de elementos contém 4290 nós e 4128 elementos, conforme mostra a Figura 22.

A análise termomecânica acoplada se inicia considerando que todo o cilindro está a uma temperatura uniforme de 850 °C (1123K), semelhante às condições do trabalho de Pacheco et al. (2001a). O resfriamento do material é definido pela imposição de uma condição de contorno de variação de temperatura nos nós da superfície do cilindro. Esta variação de temperatura está baseada nos valores obtidos de medições experimentais do processo de têmpera utilizados por Camarão (1998) e estão igualmente apresentados na Figura 22. Com isso, considera-se a condução de calor no cilindro e seu resfriamento durante o tempo de 100s até a temperatura de aproximadamente 30°C.

O calor latente de transformação não foi considerado nas simulações dessa primeira abordagem, nem a alteração das propriedades mecânicas em função da composição entre os microconstituintes formados. Assumiu-se, assim, que as propriedades mecânicas variam segundo as Equações 10 a 15 e não conforme os dados da Tabela 3, como indicado por Bhadeshia (2002).

4.1.3 Segunda Abordagem (Proposta 2)

Para a segunda abordagem de resolução do problema termo-mecânico-microestrutural acoplado, pretendeu-se não realizar tantas simplificações no diagrama de transformação, ou seja, produzir um modelo mais amplo, coerente e genérico, diferente do modo como foi implementada a abordagem 1. Além disso, objetivou-se abordar todas as interações relevantes ilustradas na Figura 23.

Nesta abordagem, os únicos fenômenos que podem ser desconsiderados são os numerados por 3 e 4 na Figura 23. Isso porque, conforme já mencionado, e segundo Risso et al. (2004), na maioria dos tratamentos térmicos, o calor gerado pelas deformações e esforços mecânicos é irrelevante frente às outras fontes de geração de calor (desconsidera seta 4). Além disso, Camarão (1998) e Bokota e

Iskierka (1998) não consideram a plasticidade induzida por transformação nem a influência das tensões sobre as mudanças de fase. De fato, é possível desconsiderar esse efeito, assumindo que o material, em sua condição inicial, está livre de tensões (desconsidera seta 3). Os demais fenômenos (setas 1, 2, 5 e 6) e as relações com as propriedades do material serão considerados na implementação do modelo pelo uso de sub-rotinas que alteram a formulação e sequência de cálculo do programa Abaqus.

Figura 23 – Diagrama do acoplamento termo-mecânico-microestrutural e as interações com as relações entre cada fenômeno. Adaptado de Inoue, (2004).

Diferentemente da geometria utilizada na Proposta 1 (cilindro de diâmetro 45 mm e comprimento 180 mm), na Proposta 2 foi utilizada a geometria segundo a norma que descreve o ensaio Jominy (ASTM A255, 1999). Dessa forma, a extração de calor se dará predominantemente na direção longitudinal e não mais radialmente como na Proposta 1.

4.1.3.1 Materiais

Para a implementação das simulações foram consideradas as propriedades do aço SAE 4140, conforme apresentadas previamente nas Tabelas 5 (composição

química) e 6 (expansões volumétricas nas transformações de fase), além da Figura 20, que descreve as curvas de transformação para o resfriamento contínuo.

Para a definição das propriedades mecânicas e térmicas, fez-se uso dos valores da Tabela 3, que descreve as propriedades para cada fase da microestrutura dos aços. Com essa informação, é possível calcular as propriedades térmicas e mecânicas do material aplicando a lei das misturas, compondo os valores de cada propriedade por uma média ponderada pelas frações volumétricas de cada fase gerada a partir da decomposição da austenita e da austenita residual.

Assim, considerando uma propriedade genérica ϑ do material, é possível estimá-la em função da composição microestrutural.

$$\vartheta_{Total} = \vartheta_M X_M + \vartheta_B X_B + \vartheta_P X_P + \vartheta_F X_F + \vartheta_A X_A \quad (27)$$

Figura 24 – Diagrama 3D para a definição da condutividade térmica em função do tempo e da temperatura detalhando região de têmpera utilizado por Risso et al. (2004)

Nessa equação genérica, ϑ_π é a propriedade ϑ da fase π , e X_π é a fração volumétrica dessa fase. Utilizando esse método, foram calculados a condutividade térmica, o calor específico, a tensão de escoamento e o coeficiente de expansão

volumétrica do material. Procedimento similar foi feito em relação à predição dos valores de dureza do material, utilizando a composição química do material (Tabela 5) combinadas aos valores das frações volumétricas entre as fases para alimentar as equações de 21 a 23 (Maynier et al., 1978). A lei das misturas foi, ainda, utilizada para compor os valores totais das variações de entalpia, combinando os calores latentes de cada transformação de fase conforme mostra a Tabela 1 (pág. 25).

A descrição das propriedades em função das temperaturas e das fases remete ao trabalho de Risso et al. (2004), que se utiliza de gráficos tridimensionais (propriedade - tempo - temperatura) para o mapeamento das variações da microestrutura durante a têmpera, como mostra a Figura 24. Ainda que os métodos não sejam os mesmos, a intenção e o efeito da abordagem utilizada neste trabalho e a empregada por Risso et al. (2004) são equivalentes.

Já para a definição do módulo de elasticidade e do coeficiente de Poisson utilizou-se a simples dependência em relação à temperatura, visto que essas duas propriedades não apresentam grandes variações entre as diferentes fases. Os valores do módulo de elasticidade utilizado são mostrados na Figura 25.

Figura 25 – Valores do módulo de elasticidade em função da temperatura utilizados no modelamento computacional. Adaptado de ASME B31.1,1995.

4.1.3.2 Métodos

Considerando o método dos elementos finitos nos processos de simulação computacional, o cálculo dos campos de tensões e deformações acontece posteriormente ao cálculo do campo de temperaturas, sendo que a diferença entre os valores de deformações térmicas entre o incremento corrente e o incremento anterior é bastante pequena quando se utiliza um incremento de tempo controlado e adaptado às máximas e mínimas variações de temperatura. Dessa forma, num processo de análise acoplado, as deformações térmicas do incremento de tempo atual podem ser consideradas iguais às do incremento de tempo anterior e, com isso, pode-se garantir a precisão dos cálculos realizados pelo modelo (HUIPING, 2007). Esse procedimento é implementado no conjunto de sub-rotinas em FORTRAN que, executadas paralelamente às simulações do software Abaqus, permite a inclusão de modelos de transformação de fase nas análises de tratamento térmico de aços.

Figura 26 – Modelo com maior detalhamento do comportamento das curvas TTT e CRC do material

A Figura 26 mostra a discretização feita para as curvas do diagrama de transformação para resfriamento contínuo do aço SAE 4140. Os pares ordenados

(tempo, temperatura) são armazenados em arquivos texto que posteriormente são lidos pelas sub-rotinas FORTRAN. Com isso, pretendeu-se modelar as curvas CRC do material de uma forma mais fidedigna. Isso também exige o desenvolvimento de uma rotina específica para a interpolação e sobreposição entre as curvas de resfriamento e as curvas de transformação do material. Entretanto, este procedimento permite o cálculo preciso das frações volumétricas transformadas de cada nova fase microestrutural.

As sub-rotinas desenvolvidas apresentam quatro blocos principais, conforme ilustra o fluxograma da Figura 28. O cálculo das frações volumétricas de cada fase transformada é realizado pela sub-rotina UVARM. Nesse código, são abertos arquivos de entrada com os pontos discretizados das curvas de transformação, na forma de pares (tempo, temperatura). Em seguida, toma-se o valor de temperatura, obtido pela resolução do problema térmico pelo programa Abaqus®, de cada ponto da malha. Esse ponto é numericamente sobreposto ao diagrama de transformações discretizado e daí se calculam as frações volumétricas das fases por meio de uma fórmula de interpolação. Entretanto, essa interpolação é realizada admitindo-se que as transformações ocorrem a uma taxa constante de resfriamento, diferente de outros autores que consideram transformações isotérmicas (RISSO et al., 2004; SARMIENTO, 2002, 2004; e outros).

Figura 27 – Detalhe do Método de interpolação utilizado para o cálculo das frações volumétricas

A Figura 27 ilustra esse processo de interpolação entre duas curvas do diagrama CRC. As sub-rotinas guardam o instante e a temperatura do ponto em que se deu a intersecção com a primeira curva (seja uma curva de início de transformação, seja uma curva de porcentagem transformada) e, pela taxa de resfriamento aplicada, estimam em que ponto se dará a intersecção com a curva seguinte. A Figura 15 (pág. 40), aplicável aos estudos de Kang e Im (2007), pode também ilustrar o método numérico de interpolação utilizado neste trabalho.

Figura 28 – Fluxograma com as inter-relações entre os blocos de sub-rotinas desenvolvidas e o programa Abaqus®

A sub-rotina UEXPAN recebe os valores referentes às frações volumétricas e calcula a expansão volumétrica do material devido à transformação de fase, pela combinação entre os diferentes coeficientes de expansão de cada transformação, enquanto que o código relativo à sub-rotina UHARD corrige e atualiza os valores de tensão de escoamento de acordo com a porcentagem de cada fase transformada.

A estimativa da energia liberada (geração de calor pelo calor latente de transformação) para cada alteração de fase é implementada pela sub-rotina UMATHT, que também é responsável pela atualização dos valores de condutividade térmica e calor específico, de acordo com a variação de temperatura e a distribuição entre frações volumétricas. Todo esse processo é esquematizado no fluxograma da Figura 28.

Esses códigos foram, então, implementados e testados para a análise de um processo de têmpera de corpo de prova Jominy. Uma malha tridimensional de elementos finitos foi primeiramente construída para essa simulação e é apresentada na Figura 29. Esta malha apresenta 3682 nós e 3011 elementos hexaédricos de formulação termo-mecânica acoplada (tipo C3D8T).

Figura 29 – Malha de elementos finitos representativa da geometria de uma proveta Jominy (esquerda) e as dimensões do corpo de prova segundo a Norma ASTM A255 (direita).

Visto que a geometria analisada é cilíndrica, uma representação axissimétrica poderia ser utilizada na geração da malha de elementos finitos, mas a necessidade em instrumentar o ensaio real pela usinagem de furos para a inserção de sensores de temperatura anulou a simetria da peça. Daí, resulta a decisão da primeira malha de elementos finitos proposta ser tridimensional. Entretanto, verificou-se que longos tempos de processamento eram necessários para simulações que utilizavam essa malha de elementos, fato que motivou uma análise pormenorizada da influência do tipo e tamanho de malha nos resultados e nos tempos de cálculo.

Para essa avaliação, foram geradas malhas de elementos finitos axissimétricas e tridimensionais, sendo que, para essas últimas, analisou-se a influência da presença dos furos na variação dos resultados dos modelos numéricos. Para os testes, utilizou-se processador de 1,87 GHz e 2 Gb de memória virtual. Os tempos de processamento para cada análise são mostrados na Tabela 7.

Tabela 7 – Comparativo entre tempos de processamento

Modelo	Tempo de processamento (min)		
	Axissimétrico	3-D sem furo	3-D com furo
	(4 elementos/mm ²)	(0,3 elementos/mm ²)	(0,35 elementos/mm ²)
Térmico	6	13	13,5
Termo-mecânico	12,5	27	29
Termo-mecânico-microestrutural	750	1890	1915

Nota-se que há um aumento considerável no custo computacional conforme se amplia a complexidade do modelo, ou seja, do modelo puramente térmico para o termo-mecânico-microestrutural acoplado. O modelo axissimétrico, ainda que com menor número de elementos, permite uma melhor discretização da geometria analisada e menor tempo de processamento. Dessa forma, a utilização de uma malha tridimensional em detrimento a uma malha axissimétrica só se mostraria adequada caso houvesse distorção nos resultados pela presença dos furos, o que não é verificado. De fato, as diferenças são pontuais e restritas às proximidades do furo, ainda assim, inferiores a 5% nos valores de temperatura.

Por esse motivo, optou-se por utilizar malhas com simetria axial para as simulações. Ilustrações das malhas utilizadas estão na Figura 30, na qual se destaca, ainda, a possibilidade de visualização tridimensional do problema pela

simples revolução da malha axissimétrica. Foram avaliados dois níveis de refinamento da malha, que se mostraram equivalentes quanto aos resultados das simulações para predição de dureza, tensões e deformações. Entretanto, a utilização da malha com maior número de elementos permitiu melhor detalhamento da concentração das fases, acompanhando de maior tempo para processamento.

Figura 30 – Malhas axissimétricas utilizadas no modelamento, mais e menos refinadas, e extrapolação tridimensional que pode ser feita com os resultados obtidos.

Para as condições de contorno térmicas aplicadas ao modelo, utilizaram-se aproximações idealizadas das temperaturas obtidas pela instrumentação de um ensaio Jominy real, como mostra a Figura 31. Essas temperaturas foram atribuídas à face inferior do modelo, de forma a garantir o mesmo comportamento térmico verificado experimentalmente. Anteriormente a isso, porém, com a finalidade de avaliar os efeitos do aquecimento na geometria, calcularam-se as alterações das dimensões devido à elevação de temperatura de 30°C até 900 °C.

Utilizou-se, ainda, um coeficiente de convecção de 40 W/m²°C, valor compatível com o resfriamento ao ar, atuante nas faces lateral e superior do cilindro Jominy. O eixo de simetria apresenta comportamento adiabático. As temperaturas ao longo do tempo para os outros pontos são calculadas com base nessa condição de contorno.

Figura 31 – Condições de contorno térmicas (variações de temperaturas) impostas aos modelos

Já como condição de contorno mecânica, limitou-se a movimentação vertical do cilindro, impondo uma restrição aos nós em contato com o suporte do aparato Jominy. Além disso, impôs-se a condição de simetria axial ao eixo do cilindro. A Figura 32 ilustra as condições de contorno mecânicas e térmicas impostas ao modelo de elementos finitos.

Figura 32 – Condições de Contorno impostas ao modelo. (A) Mecânicas, (B) Térmicas

4.1.4 Limitações do Modelamento

Os modelos propostos apresentam limitações na medida em que realizam uma avaliação de fenômenos microestruturais avaliando parâmetros e propriedades macroscópicos. Com as informações obtidas, não se podem fazer inferências a respeito de mudanças de forma ou orientação cristalográficas. As deformações calculadas não levam em conta os planos de hábito ou direções de deslocamento do material (Bhadeshia, 2002). As frações volumétricas calculadas são um recurso para análise qualitativa e quantitativa na medida em que se podem estimar as quantidades de cada microconstituente na estrutura. Entretanto, não se tem informação acerca organização espacial entre as fases.

4.2 Ensaio em Laboratório

4.2.1 Ensaios Jominy e Metalografia Quantitativa

A norma ASTM A255 (1999) apresenta a descrição para realização do ensaio para avaliação da temperabilidade de aços conhecido como Ensaio Jominy.

Figura 33 – Ilustração do Aparato para o Ensaio de Temperabilidade Jominy.
Adaptada de Chiaverini (1986).

A temperabilidade de um aço, ou seja, a capacidade de se obter martensita por tratamento térmico de têmpera é avaliada por meio de medições de dureza

superficial ao longo do comprimento de um corpo de prova cilíndrico, sujeito a um tratamento térmico específico.

O ensaio consiste na utilização de um dispositivo onde se coloca um corpo de prova cilíndrico (Figura 34), austenitizado, sobre um jato de água, como mostra a Figura 33, até seu total resfriamento. Posteriormente, é feita a medida de dureza ao longo de todo o seu eixo axial. Quanto mais distante da face que recebe o jato de água, menor tenderá a ser a fração de martensita formada.

Figura 34 – Dimensões do corpo de prova cilíndrico para o ensaio Jominy. Fonte: ASTM A255 (1999)

Existem diversas medidas possíveis de serem realizadas para determinar a fração volumétrica e as proporções entre fases em uma seção polida. A estereologia mostra que a fração de área entre fases em uma seção polida é idêntica à fração em volume, desde que as fases estejam distribuídas ao acaso (PADILHA e AMBROZIO, 1985). A norma ASTM E562-02 (2002) descreve método sistemático de contagem manual de pontos, através de uma grade de pontos, que pode ser utilizado para determinação estatística da fração volumétrica de constituintes identificáveis ou fases na microestrutura de em espécime opaco, polido e com seção transversal plana.

Conta-se o número de pontos que caem sobre uma determinada fase no plano de polimento. O número de pontos que caem sobre a fase, dividido pelo número total de pontos fornece a fração de pontos. Este procedimento é, então, repetido para diferentes campos da amostra até se obter uma média e desvio

padrão previamente definidor por cálculos estatísticos para um dado grau de confiança.

Tal procedimento de contagem pode ser feito em fotos ou diretamente no microscópio, ou seja, usa-se um reticulado sobre as micrografias, ou na ocular do microscópio, com certo número de pontos.

4.2.2 Validação Experimental

A validação do modelo numérico computacional proposto neste trabalho se deu pela comparação entre os resultados calculados e os obtidos experimentalmente por meio de ensaios Jominy instrumentados, e posterior avaliação das propriedades do material (medições de dureza superficial) e efeitos do tratamento (distorções geométricas). Além disso, medições posteriores e ensaios metalográficos permitiram a contagem das frações volumétricas dos microconstituintes transformados e a estimativa dos níveis de tensões residuais no material ensaiado, fornecendo meios para a comparação entre modelo e experimento.

Para os ensaios experimentais da têmpera instrumentada de um corpo de prova Jominy, foram utilizadas barras laminadas de aço SAE 4140, que, após usinagem apresentou dureza média de 209 HV, como condição anterior ao tratamento térmico.

No Anexo A apresenta-se a geometria proposta para o corpo de prova que foi utilizado no ensaio Jominy adaptado e instrumentado. Os dois furos, de 1 mm de diâmetro, longitudinais na peça foram projetados com o objetivo de permitir o acoplamento de termopares para a captação dos valores de temperatura no centro da peça durante o processo de têmpera. Para a usinagem dos furos, utilizou-se processo de eletroerosão por capilar, com eletrodo de latão de 1 mm de diâmetro, processo que garantiu furos retilíneos e paralelos. Os sensores de temperatura utilizados foram termopares tipo K, de 1 mm de diâmetro e haste de 200 mm de comprimento, com taxa de aquisição utilizada de 10 Hz. A coincidência entre os diâmetros dos termopares e dos furos foi planejada na intenção de minimizar efeitos

convectivos e radiativos no interior dos furos. Ademais, a variação das temperaturas na superfície do corpo de prova Jominy também foi obtida pela utilização de um terceiro termopar.

A Figura 35 ilustra os equipamentos utilizados no experimento. Foram eles: um forno elétrico com controle automático da temperatura, próximo ao aparato com suporte para fixação do corpo de prova, bocal para jato d'água e recipiente para coleta da água utilizada. Pela norma ASTM A255 (2002), o tempo entre a retirada da peça do forno e o início da têmpera não pode ultrapassar 5 segundos.

Figura 35 – Aparato para realização de série de ensaios Jominy instrumentados

Planejou-se a execução de 5 ensaios, com a austenitização das peças a 900°C por 1 hora, seguido pela têmpera variando-se a taxa de resfriamento imposta ao material pelo controle da vazão de água do jato de resfriamento. Dessa forma, a fim de garantir um mínimo de repetibilidade¹⁰ ao ensaio e possibilitar um tratamento

¹⁰ Repetibilidade é a confirmação de um resultado a partir da repetição do experimento, pelo mesmo pesquisador ou por outros, mas necessariamente com amostras diferentes das originais, de modo a garantir que os resultados se repitam. Já reprodutibilidade é a repetição do experimento por outros

estatístico dos dados, decidiu-se por realizar 3 repetições utilizando a vazão máxima, 215 ml/s, e outras 2 com uma vazão inferior, de 150 ml/s.

Os ensaios foram numerados de 1 a 5, sendo os 3 primeiros realizados à vazão máxima e os 2 últimos com a vazão reduzida.

Figura 36 – Pontos de Amostragem idealizados para o ensaio com vazão 215 ml/s

Um inconveniente observado durante os ensaios e subestimado durante a concepção dos experimentos foi o efeito da oxidação do material, em especial na região interna dos furos para inserção dos termopares. O processo de usinagem foi planejado de forma a garantir uma folga mínima entre furo e termopar à temperatura ambiente,. Em teoria, essa folga é aumentada com o aquecimento do material a 900°C pela dilatação do material e consequentemente do furo, permitindo a inserção dos termopares conforme esquema da Figura 36. Isso foi verificado para os primeiros ensaios, nos quais a amostragem das temperaturas se deu como planejado. Entretanto, visto que os tempos de austenitização não foram exatamente iguais, aumentando entre o primeiro e o último ensaio, notou-se que os efeitos de oxidação no interior do furo se sobrepuseram ao efeito da dilatação, reduzindo o diâmetro dos furos e impedindo o acoplamento dos termopares no interior dos corpos de prova. Por essa razão, a amostragem das temperaturas nos ensaios 4 e 5

se deu em pontos diferentes, somente na superfície, conforme é ilustrado na Figura 37, e não em pontos internos (Figura 36).

Outro ponto relevante foi que, para o ensaio 3 (vazão de 215 ml/s), houve contato entre o jato de água e a superfície lateral da peça devido à formação e desprendimento de uma camada de óxido, que formou um canal entre o óxido e a nova superfície lateral formada, por onde o fluido refrigerante penetrou. Pela norma ASTM A255 (2002) esse fato pode distorcer o caráter direcional da perda de calor. Dessa forma, ainda que os resultados de temperatura amostrada tenham coincidido com os dois ensaios anteriores, decidiu-se por descartar o corpo de prova do ensaio 3, desconsiderando seus resultados e medições posteriores. A Tabela 8 detalha a sequência de ensaios realizada, com as condições e pontos de amostragem de temperatura.

Figura 37 – Novos Pontos de Amostragem para o ensaio com vazão 150 ml/s

As temperaturas amostradas no ensaio real alimentaram a condição de contorno térmica, enquanto que os outros dois permitiram o controle para garantir que as propriedades do material utilizadas na simulação fossem coerentes e que o problema térmico fosse resolvido adequadamente.

Terminado o tratamento térmico, a camada de óxido formada foi raspada e foram realizadas medições das alterações dimensionais das peças. A espessura da camada de óxido formada também foi avaliada.

Posteriormente, as peças temperadas foram retificadas para realização de medições de macro dureza Vickers ao longo do comprimento da peça, utilizando-se carga de 30 Kg. As trilhas retificadas nas peças podem ser observadas na Figura 38-B.

Tabela 8 – Sequência e aproveitamento dos ensaios realizados

Ensaio	Condição de Resfriamento	Pontos Amostrados				Aproveitamento
		Base (interior)	Topo (externo)	Lateral Inferior	Lateral Superior	
1	Severo	X	X			Sim
2	Severo		X	X	X	Sim
3	Severo		X	X	X	Descartado
4	Moderado		X	X	X	Sim
5	Moderado		X	X	X	Sim

Figura 38 – (A) Amostra em estado imediatamente após o término do tratamento térmico. (B) Trilhas longitudinais usinadas para medição de dureza superficial.

Em seguida, as amostras foram cortadas longitudinalmente em diferentes pontos e seguiu-se com a preparação metalográfica convencional e ataque químico para destacar as fases formadas. Como reagente para o ataque, utilizou-se Nital 3%, com imersão das peças na solução por 5 segundos. Posteriormente, realizou-se a contagem das frações volumétricas utilizando-se a norma ASTM E562 (2002) e o

programa para processamento de imagens Lispix, versão Lx157P. Esse programa permite a contagem do número (ou porcentagem) de pixels de determinada tonalidade em uma imagem, de forma que seu uso possibilita estimar as frações volumétricas entre fases de fácil identificação.

Todos os resultados obtidos experimentalmente foram comparados aos resultados calculados pelo emprego do modelo numérico computacional da Proposta 2.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Resultados da Proposta 1

A análise numérica conduzida neste trabalho permitiu a obtenção de resultados relativos aos campos de temperatura e tensão desenvolvidos durante a têmpera de um cilindro ($\Phi=45$ mm; $L=180$ mm) considerando-se as transformações de fase do aço SAE 4140, a partir de diferentes simplificações das curvas de transformação CRC e TTT. A Figura 39 apresenta o histórico de temperaturas para diferentes posições ao longo do raio do cilindro, do centro para a superfície. As curvas de temperatura foram sobrepostas ao diagrama de transformação simplificado para cada um dos 4 modelos. No Modelo 1a, apenas a região próxima à superfície se transformará de austenita para martensita, enquanto que para o Modelo 1b todo o cilindro se transformará em martensita. Na Figura 39 deve se observar, ainda, que, no Modelo 3, a presença da região de formação de perlita no diagrama simplificado é irrelevante, uma vez que nenhuma das curvas de resfriamento atravessa essa região do diagrama.

A Figura 40 e a Figura 41 ilustram o desenvolvimento do campo de tensões térmicas em um quarto do cilindro temperado. Na Figura 40, o campo de tensões radiais é mostrado na parte inferior da figura para os quatro diferentes modelos propostos e o campo de temperaturas é colocado na parte superior, detalhando 5 instantes de tempo em intervalos de 20 segundos. Na Figura 41 é apresentado o campo de tensões longitudinais, detalhando-se os mesmos 5 instantes de tempo em intervalos de 20 segundos, para cada um dos 4 modelos. Tanto na Figura 40 quanto na Figura 41, pode-se observar que os campos de tensão com as componentes radial e longitudinal são compressivos na superfície e estão sob tração no núcleo no Modelo 1a, devido à deformação plástica que ocorre. Os resultados dos Modelos 1b, 2 e 3 apresentam uma configuração oposta do campo de tensões quando comparados ao Modelo 1a, além de mais áreas com tensão compressivas, como consequência das formações de bainita e ferrita durante o tratamento térmico.

Tensões e deformações adicionais ocorrem na presença de transformação de fase, devido a diferenças nas propriedades (por exemplo, o coeficiente de expansão térmica) das fases presentes no material. A formação de tensão residual

na presença de mudanças de fase e suas complexidades inerentes foram discutidas por Ebert (1978). Semelhantes aos resultados apresentados por esse autor, as Figuras 40 e 41 indicam que uma área com tensão compressiva eventualmente torna-se sujeita a tensão trativa, dependendo da transformação de fase que ocorre no material. Também de acordo com as Figuras 40 e 41, os Modelos 1b, 2 e 3, tanto nos campos de tensões nas direções radial e longitudinal, apresentam tensões positivas na superfície, mas a magnitude não é tão grande quanto aquela observada pelos cálculos do Modelo 1a. Os resultados do Modelo 1a confirmam a predição de Hardin e Beckermann (2005) para a transformação martensítica, na medida em que a expansão volumétrica na superfície do cilindro devida à transformação martensítica produz compressão no centro do cilindro, onde ainda não há mudança de fase (como pode ser observado na Figura 40, no Modelo 1a). Quando ocorre deformação plástica no centro do cilindro, o campo de tensões muda de compressivo para trativo. Pode-se admitir que a razão pela qual o Modelo 1a resulta em tensões trativas mais elevadas é que, quando a martensita se forma, elevadas tensões compressivas surgem na superfície.

Figura 39 – Sobreposição entre as curvas de resfriamento calculadas e os diagramas de transformação de fase simplificados. Direção das setas indica as curvas de resfriamento da superfície para o centro do cilindro.

Os campos de tensões que surgem nos Modelos 1b, 2 e 3 são predominantemente compressivos. Para esses modelos, diferentemente do Modelo 1a, o centro e a superfície do cilindro expandiram durante as mudanças de fases da têmpera. O centro e a superfície se transformam em martensita pelos cálculos do Modelo 1a; no Modelo 2, a superfície se transforma em martensita enquanto que o centro do cilindro se transforma de austenita em perlita; para o Modelo 3, o centro do cilindro se transforma de austenita em bainita e ferrita. Todas essas mudanças de fase estão associadas a uma expansão volumétrica específica, de acordo com a Tabela 6 (pág. 57), e quando o centro do cilindro expande, o campo de tensões se inverte devido ao centro colocar a superfície sob tração, aliviando as tensões compressivas geradas durante a formação da martensítica.

Figura 40 – Distribuição de tensões radiais calculadas para o cilindro de aço SAE 4140 ($\Phi=4,5$ cm e $L=18$ cm)

Em termos práticos, a Figura 40 indica que os Modelos 1b, 2 e 3 sugerem que trincas, causadas por esforços radiais, poderiam se iniciar e se propagar no centro do cilindro durante os primeiros instantes do resfriamento. Por outro lado, em termos de tensões longitudinais (Figura 41), os resultados fornecidos por esses três modelos não concordam perfeitamente com o esperado pelo trabalho de Ebert (1978), uma vez que os Modelos 1b e 2 indicam que a fratura frágil devida a esse tipo de tensão se iniciaria mais provavelmente na superfície, enquanto que o Modelo 3 indica que ela se iniciaria no centro. Os Modelos 1b, 2 e 3 indicam que eventuais trincas devido aos esforços internos axiais apareceriam e/ou se propagariam preferencialmente também nos primeiros estágios do resfriamento.

Figura 41 – Distribuição das tensões axiais¹¹ calculadas para o cilindro de aço SAE 4140 ($\Phi=4,5$ cm e $L=18$ cm)

Considerando-se a distribuição de tensões ao longo do raio do cilindro no fim do processo de têmpera (Figura 42), e a fim de comparar esses resultados aos obtidos por Pacheco et al. (2001a), nota-se que similarmente ao que foi exposto na discussão sobre as Figuras 40 e 41, a ocorrência de mudança no volume devido à formação de martensita está provavelmente associada com deformações plásticas (EBERT, 1978), e seguindo-se a isso, formam-se tensões compressivas. Este

¹¹ As tensões axiais podem também ser denominadas por tensões longitudinais. Esta alternância de nomenclatura é utilizada no texto

fenômeno também pode ser observado na Figura 42 para o Modelo 1a, pois a curva de tensão em função do raio do cilindro mostra tensões compressivas na superfície e trativas no centro do cilindro. Este comportamento está de acordo com as conclusões de Pacheco et al. (2001a), no que se refere à transformação martensítica. Para os outros três modelos, a consideração das outras mudanças de fase, complementares à formação da martensita, também fornecem resultados coerentes, apresentando uma configuração de tensões de compressão no núcleo do cilindro e tensões de tração próximo à superfície.

Os resultados apresentados nesta proposta estão, sob um aspecto qualitativo, de acordo com os resultados apresentados por Pacheco et al. (2001a) e Camarão (1998).

Figura 42 – Resultados de tensões calculadas ao longo do raio do cilindro na posição central em relação ao seu comprimento, ao fim da têmpera

5.2 Resultados da Proposta 2

A análise numérica conduzida nesta segunda abordagem para a resolução do problema termo-mecânico-microestrutural permitiu o cálculo de resultados relativos aos campos de temperatura, estimativas do nível de distorções na geometria, valores de dureza em todos os pontos da peça após o tratamento térmico, frações volumétricas das fases após o tratamento e os níveis de tensão residual desenvolvidos durante e após a têmpera de um corpo de prova Jominy de material aço SAE 4140 pelo modelamento e discretização das curvas de transformação CRC do material. A seguir, são apresentadas comparações entre os resultados calculados numericamente e os medidos após ensaio experimental.

5.2.1 Temperaturas

A instrumentação do ensaio Jominy pelo uso de termopares na superfície e no interior da peça permitiu a obtenção da variação de temperaturas em alguns pontos da geometria, como mostra a Figura 43 para o tratamento térmico referente ao resfriamento rápido (ensaio 1 e 2) e a Figura 44 para o resfriamento moderado (ensaio 4 e 5). Nota-se que, em ambos os casos, o tempo necessário para atingir temperaturas inferiores a 100°C é superior a 10 minutos.

Figura 43 – Resultado experimental da variação da temperatura durante tratamento térmico com jato de água a vazão de 215 ml/s

Pode-se observar, nitidamente, o fenômeno da geração de calor devido às transformações de fase pelos pontos de aumento de temperatura, como os da região destacada na Figura 43. Ao verificar o diagrama de transformação de fase do aço SAE 4140 (Figura 20), é possível confirmar que essas elevações de temperatura ocorreram exatamente nos tempos e temperaturas previstos para o início das transformações (WOODARD et. al, 1999). Níveis similares de elevações de temperaturas foram observadas por Woodard et. al (1999) e por Sarmiento e Lauro (2002) para aço SAE 4140 e outros materiais.

Figura 44 – Resultado experimental da variação da temperatura durante tratamento térmico com jato de água a vazão de 150 ml/s

Figura 45 – Comparação entre o comportamento térmico simulado e o real para o caso da refrigeração mais severa

A Figura 45 apresenta os resultados da simulação para cálculo das temperaturas na condição de resfriamento mais severo. Nesta figura, apresenta-se, também, parte dos resultados experimentais da Figura 43. Ainda que os resultados do modelo não apresentem comportamento idêntico ao verificado experimentalmente, pode-se observar comportamento semelhante, com pontos de elevação da temperatura próximos aos 100 segundos de ensaio. Já a Figura 46 traz um comparativo entre as curvas de temperatura obtida experimentalmente e a calculada pelo modelo numérico para dois pontos da lateral do corpo de prova Jominy ensaiado com resfriamento moderado.

Figura 46 – Comparação entre o comportamento térmico simulado e o real para o ensaio com resfriamento moderado.

A semelhança entre os comportamentos das curvas experimentais e das obtidas pelo modelo numérico indica que o modelo térmico desenvolvido, as alterações nas equações de transferência de calor para inserção dos efeitos dos calores latentes e as propriedades térmicas utilizadas foram coerentes e adequadas à realidade do problema, pois permitiram a correta representação do fenômeno de condução de calor no material.

As pequenas diferenças entre as curvas experimentais e calculadas podem ter sido causadas pelo efeito da utilização de um coeficiente de convecção apenas estimado e não meticulosamente calculado. Ainda assim, uma nítida correlação entre os valores das temperaturas e seu comportamento no tempo faz-se notar e

permite a utilização do campo de temperaturas modelado para o cálculo das demais variáveis de interesse do problema.

5.2.2 Distorções e Alterações Dimensionais

O resfriamento no processo de têmpera tem influência significativa na distorção final da peça. Esta distorção é regida por fatores variados, diferentes e complicados, como o tipo de equipamento utilizado, o meio de têmpera, a temperatura e o nível de agitação do fluido refrigerante, o método de resfriamento utilizado, etc.

Admitindo a contração volumétrica no resfriamento de 900°C a 30°C somada aos efeitos de expansão volumétrica devido às mudanças de fase, é interessante analisar seus efeitos sobre a geometria da peça e as distorções impostas pelo tratamento térmico. Dessa análise provêm os valores de alteração dos diâmetros dos corpos de prova Jominy resfriados de forma rápida, que são apresentados na Figura 47. Na mesma, comparam-se os resultados calculados pelo modelo numérico aos medidos experimentalmente.

Ainda que os efeitos dessa distorção não possam ser analisados precisamente, visto que a formação de camada de óxido na superfície da peça promove o descolamento de material, uma estimativa da correlação entre os resultados experimentais e os calculados pela simulação numérica pode ser executada. A espessura média da camada de óxido formada e retirada após o tratamento térmico foi de 155 μm . Esse valor médio foi somado ao diâmetro final medido, a fim de compor adequadamente os valores da variação dimensional.

A Figura 47 mostra que o valor calculado para a máxima variação dimensional, observada na face que recebe o contato com o jato d'água, apresenta boa correlação com as medições experimentais, muito provavelmente porque essa região foi a que menos sofreu os efeitos da oxidação. Entretanto, essa aderência entre as curvas não é verificada para os demais pontos, ainda que o comportamento geral seja semelhante.

Já a Figura 48 traz informação análoga relativa aos ensaios com resfriamento moderado. Nesse caso, os valores da distorção no ponto de contato

com o jato d'água, calculados e medidos, não coincidem. Novamente, observa-se que o comportamento geral das duas curvas é semelhante um em relação ao outro.

Figura 47 – Comparativo entre a alteração dimensional simulada e a medida após o tratamento térmico de têmpera com resfriamento rápido

Figura 48 – Comparativo entre a alteração dimensional simulada e a medida após o tratamento térmico de têmpera com resfriamento moderado

Os efeitos da oxidação impediram uma conclusão mais enfática sobre a eficiência do modelo numérico na previsão de distorções geradas pela têmpera em aços. Tomando como base trabalhos da literatura que fizeram esse mesmo estudo experimental, chega-se a Ramanathan e Foley (2001), que relatam o comportamento apresentado na Figura 49 para a variação de diâmetros em um

corpo de prova Jominy de aço SAE 4140. Novamente, ainda que não se verifique o comportamento idêntico entre as curvas obtidas, seja experimentalmente, seja numericamente, e a apresentada por Ramanathan e Foley (2001), nota-se que o valor de máxima distorção coincide nas 3 situações para a têmpera com resfriamento mais rápido.

Figura 49 – Alterações dimensionais em proveta Jominy de aço SAE 4140. Fonte: Ramanathan e Foley (2001)

5.2.3 Frações Volumétricas dos Microconstituintes

Este capítulo será destinado aos resultados experimentais de cálculo das frações volumétricas, análise microestrutural e metalografia do material ensaiado.

A Figura 50 ilustra os resultados numéricos para a decomposição da austenita ao longo do tempo de tratamento térmico na região que entra em contato com o jato d'água, relativos aos casos com resfriamento severo (Ensaio 1 e 2). Ao fim do tratamento térmico, uma porcentagem inferior a 5% remanesce sob a forma de austenita retida, enquanto que aproximadamente 95% está sob a forma de martensita.

Ainda na Figura 50, nota-se que não se atingiu a formação de perlita, visto que o resfriamento imposto ao material foi rápido o suficiente para garantir a quase

completa transformação da austenita em martensita, evitando sua decomposição na forma dos outros microconstituintes.

A Figura 51 apresenta o resultado numérico da evolução entre as fases transformadas durante o processo de têmpera do corpo de prova Jominy, ainda para o resfriamento rápido, em um ponto localizado no eixo do cilindro à metade da altura da proveta, detalhando a decomposição da austenita e a formação de ferrita, bainita e martensita. Dessa forma, pode-se notar que as maiores concentrações de martensita estão localizadas nas regiões onde o resfriamento é mais brusco. Esse resultado é coerente com os apresentados por Pacheco et al. (2001a) e condizem com o esperado pelas equações de Koistinen e Marburger (1959).

Figura 50 – Resultado numérico da evolução das frações volumétricas na face inferior da proveta Jominy durante a têmpera do material

Analisando as simulações das transformações de fase que ocorrem em seções mais distantes do jato de água, percebe-se, pela Figura 51, que para esses pontos ocorre maior formação de perlita, enquanto que uma pequena quantidade de martensita (inferior a 10%) é formada nos instantes finais do resfriamento.

Já a formação de bainita só ocorre em pontos próximos da região que dista entre 5 e 15 mm da face inferior do corpo de prova (a face que entra em contato com a água). A Figura 52 ilustra a evolução das fases ao longo do tempo para um ponto dessa região. Note que, para essa posição, a bainita se forma em maiores

quantidades, seguida da martensita e perlita. As demais fases apresentam quantidades insignificantes.

Figura 51 – Resultado numérico da evolução das frações volumétricas na metade do corpo de prova Jominy durante a têmpera do material

Figura 52 – Resultado numérico da evolução das frações volumétricas na posição equivalente a 1/10 da altura da proveta Jominy durante a têmpera do material

Para efeito de comparação com as informações obtidas numericamente sobre as frações volumétricas, a Figura 53 apresenta uma sequência de micrografias obtidas de várias posições ao longo da altura da proveta Jominy, às distâncias de 4 mm, 50 mm e 100 mm em relação à face que recebe o jato de água.

Figura 53 – Alteração microestrutural em função da distância em relação à face resfriada. Proveta submetida a resfriamento rápido.

Pode-se notar que a estrutura próxima à base é essencialmente constituída por martensita. As quantidades de bainita e austenita retida não são identificáveis por essa micrografia. Já para as posições que distam 50 mm em relação à base (nomeadas na Figura 53 por “Meio”), observa-se a presença de ferrita e perlita, não sendo identificável visualmente a ocorrência de outras fases. O mesmo é observado para a posição “Topo”, que dista 100 mm da face inferior, com grande presença de perlita e ferrita. Nessa terceira posição a perlita apresenta morfologia um pouco diferente da vista na posição “Meio”.

A fim de obter informações quantitativas sobre as frações volumétricas transformadas após o tratamento térmico, utilizaram-se as ferramentas de contagem de frações volumétricas segundo a Norma ASTM E-562 (2002) e o programa Lispix (*Lispix Image Processing Tool for PC*; LISPIX, 2010). Ainda que esses métodos não forneçam valores precisos quanto à distribuição dos microconstituintes, permitem uma avaliação eficiente. As informações colhidas após essa quantificação das fases são apresentadas na Tabela 9, referente aos ensaios realizados com maior taxa de resfriamento e, na Tabela 10 relativa aos corpos de prova submetidos a resfriamento moderado. Os valores obtidos experimentalmente estão acompanhados pelos valores fornecidos pelo modelo de elementos finitos.

Tabela 9 – Comparação entre os valores das frações volumétricas formadas ao final dos ensaios Jominy com resfriamento rápido, medidas experimentalmente e calculadas numericamente.

	Experimento					
	Ferrita	Perlita	Bainita	Martensita	Austenita	Retida
Base (L=4 mm)	0	0	0	100%	-	-
Meio (L=50 mm)	5-10 %	90-95 %	-	0	-	-
Topo (L= 100 mm)	15-20%	75-80 %	-	0	-	-
	Simulação					
	Ferrita	Perlita	Bainita	Martensita	Austenita	Retida
Base (L=4 mm)	0,10%	0	2-3 %	93-95 %	5-7 %	
Meio (L=50 mm)	1-5 %	93-95 %	0	5-6 %	0,5-0,8 %	
Topo (L= 100 mm)	10-12 %	75-83 %	0-7 %	3-4 %	0,60%	

Tabela 10 – Comparação entre os valores das frações volumétricas formadas ao final dos ensaios Jominy com resfriamento moderado, medidas experimentalmente e calculadas numericamente.

	Experimento					
	Ferrita	Perlita	Bainita	Martensita	Austenita	Retida
Base (L=4 mm)	0	0	0	100%	-	-
Meio (L=50 mm)	5%	95-98 %	-	0	-	-
Topo (L= 100 mm)	10-15%	85-90 %	-	0	-	-

	Simulação					
	Ferrita	Perlita	Bainita	Martensita	Austenita	Retida
Base (L=4 mm)	0,70%	0	5-8 %	85-90 %	6-7 %	
Meio (L=50 mm)	2%	90-92 %	0	5%	0,5-0,7 %	
Topo (L= 100 mm)	12-15 %	85-90 %	0-2 %	3-4 %	0,5-0,6 %	

Pela comparação entre os valores das Tabelas 9 e 10, observa-se que o modelo numérico foi capaz de prever, com diferenças inferiores a 5%, as frações volumétricas de martensita, perlita e ferrita transformadas ao final da têmpera. Nesse caso, conclusões não podem ser tomadas quanto à correção ou erro na previsão das frações volumétricas de bainita transformada e austenita retida, visto que a análise metalográfica não permitiu a quantificação dessas fases. Entretanto, é notório que, caso essas fases estejam presentes na microestrutura, mesmo não identificadas, foram computadas como uma das fases identificadas, fato que pode justificar as diferenças entre os valores medidos e os calculados da ordem de 2 a 5% nas porcentagens de ferrita e perlita.

De fato, como exemplo, para os Ensaios 1 e 2 (resfriamento rápido), o experimento aponta para aproximadamente 75 % de perlita e 25% de ferrita na posição “Topo”. Já o modelo numérico apresenta os valores mínimos de 75% de perlita, 10% de ferrita e 10% de outras fases (martensita + bainita + austenita).

Para os demais pontos, a aderência entre os valores medidos e calculados é significativa.

A Figura 54 mostra os resultados da simulação numérica da distribuição da porcentagem de martensita transformada em uma extrapolação do modelo

axissimétrico para a visualização 3-D, e consequente decomposição da austenita, ao final da têmpera realizada no corpo de prova Jominy submetido a resfriamento rápido.

Figura 54 – Porcentagem de martensita formada ao final do processo de têmpera da proveta Jominy

Por sua vez, a Figura 55 apresenta a previsão das frações volumétricas de todas as fases formadas ao final da têmpera com resfriamento rápido (equivalente aos Ensaios 1 e 2). Os resultados são apresentados na forma de campo de distribuições ao longo da geometria.

Novamente, esses resultados são semelhantes e equivalentes aos apresentados por Pacheco et al (2001a, 2007), Jin (2001) e Lee et. al (2010).

Nota-se que a maior quantidade de austenita residual, em torno de 6%, concentra-se na região onde há maior concentração de martensita. Esse resultado pode indicar o efeito do valor da temperatura M_f sobre a quantidade de austenita residual presente na estrutura. Como a quantidade de austenita não pôde ser quantificada experimentalmente, é possível ainda a existência de alguma inconsistência nos coeficientes da Equação (19), de Koistinen e Marburguer (1959).

Observa-se, ainda, que a estrutura final dos pontos distantes da face refrigerada é essencialmente perlítica, fato esperado pela configuração do diagrama CRC do aço SAE 4140.

Figura 55 – Distribuição das fases ao final do tratamento térmico de têmpera com resfriamento rápido.

5.2.4 Dureza Vickers

As curvas de predição de dureza do modelo (Equações 20 a 26) tiveram boa aderência em relação aos valores medidos experimentalmente, tanto em relação ao valor máximo da dureza quanto em relação à distribuição dessa propriedade ao longo da superfície da peça, como pode ser observado na Figura 56 para a condição de resfriamento severo (Ensaio 1 e 2) e na Figura 57 para a condição de resfriamento moderado (Ensaio 4 e 5).

Figura 56 – Comparação entre valores de dureza Vickers (resfriamento severo)

Figura 57 – Comparação entre valores de dureza Vickers (resfriamento moderado)

Esses resultados mostram que o uso das relações de Maynier et al. (1978) permite o correto modelamento e predição dos níveis de dureza em uma peça submetida a processos de têmpera. Os resultados são, ainda, semelhantes aos apresentados por Lee et al. (2010), que estimam a dureza Rockwell C superficial de cilindro temperado como no ensaio Jominy.

Ainda em relação à Figura 56 e à Figura 57, a região entre 20 e 40 mm da altura, que apresenta menor equivalência entre as curvas, coincide com a transição entre uma região bainítica e uma região perlítica, de modo que essa pode ser a razão da diferença de aproximadamente 50 HV.

Figura 58 – Variação da Dureza Vickers ao longo do raio para 3 posições da altura da proveta Jominy. Comparação entre valores calculados pelo modelo numérico e medidos experimentalmente.

A Figura 58 apresenta a variação de dureza ao longo do raio em 6 seções transversais (3 para o corpo de prova resfriado de modo severo e outras 3 para o resfriado moderadamente), em 3 posições da altura em relação à base (L). Nota-se que na quase totalidade dos pontos, há equivalência entre as curvas, consideradas as barras de incerteza das medições. Tomando-se as médias das durezas ao longo do raio, há nova equivalência entre os resultados, que também se equivalem aos apresentados por Ramanathan e. Foley (2001).

5.2.5 Tensão Residual

Neste capítulo são analisados os resultados de tensão residual calculados pelo modelo, pela comparação com resultados teóricos esperados e por resultados experimentais descritos na literatura.

Figura 59 – Tensões residuais ao longo do raio para a seção transversal equivalente à face inferior do corpo de prova (h=0 mm)

A Figura 59 mostra os valores da tensão residual atuante, ao final do processo de têmpera severa, relativos à seção imediatamente acima da face que recebe o jato de água. A Figura 60 faz o mesmo para uma seção transversal na metade do comprimento longitudinal do corpo de prova. Ambas as figuras trazem os resultados de tensão em função do raio do espécime.

Nota-se que as tensões radiais e tangenciais são sempre compressivas na seção próxima ao jato de água, conforme o comportamento previsto para as regiões superficiais de uma peça temperada (Ebert, 1979). O comportamento da componente axial também é equivalente ao relatado na literatura.

Figura 60 – Tensões residuais ao longo do raio para a seção transversal equivalente à metade da altura do corpo de prova ($h=50$ mm)

Na região em que o resfriamento é mais brando, verifica-se o mesmo comportamento descrito por Inoue e Tanaka (1975) para a tensão axial. O comportamento da tensão tangencial é semelhante ao observado pelos mesmos pesquisadores, com a diferença de ser compressiva em toda a seção. Já a tensão radial é compressiva no núcleo e nula na superfície.

Em termos quantitativos, os valores das tensões, quando tratativas, não ultrapassam os 70 MPa. Para as tensões compressivas, o valor excede os 150 MPa na região próxima ao jato de água e é inferior a 50 MPa na seção à metade da altura do corpo de prova. Inoue e Tanaka (1975) relatam um máximo valor de 80 MPa (Figura 18) para tensões tratativas. Desse modo, o comportamento e valores máximos de tensão calculados pelo modelo são próximos ao relatado pela literatura.

A Figura 61 ilustra a variação do campo de tensões, nas três direções principais, na seção longitudinal do corpo de prova Jominy (resfriamento rápido) ao longo do tempo de tratamento, juntamente com a variação de temperaturas.

Figura 61 – Evolução das tensões ao longo da têmpera no corpo de prova Jominy.

São analisados os instantes 3, 10, 20, 50, 100, 200, 500 e 800 segundos. Em relação à variação de temperatura é fácil observar o caráter predominantemente axial em relação à extração de calor, visto que o efeito de perda de calor pela face lateral (convecção com o ar) é pouco significativo se comparado ao efeito do resfriamento pelo jato de água.

Em relação à componente radial do campo de tensões, pode-se observar que nos instantes iniciais da têmpera surgem tensões trativas próximo à base do corpo de prova, que se propagam para seções mais distantes da base e que estão relacionadas ao início da transformação martensítica.

Pode-se notar que os campos de tensões são predominantemente compressivos ou levemente trativos, de forma que picos de tensão surgem como uma faixa transversal na altura de aproximadamente 7 mm em relação à base do corpo de prova. Esses picos de tensão surgem próximo aos 100 segundos de resfriamento, com tensões trativas de aproximadamente 1,4 GPa. Analisando a Figura 61 juntamente com a Figura 52, observa-se que o surgimento dessa faixa de máxima tensão coincide com a máxima formação de bainita e início de formação da martensita para os pontos analisados.

Em termos práticos, a Figura 61 indica que uma eventual fratura do corpo de prova Jominy se iniciaria pelo surgimento e propagação de uma trinca interna próximo aos 7 mm de distância em relação à base, causada por esforços nas três direções principais e ocorreria preferencialmente após os 100 segundos de resfriamento.

Pode-se observar ainda que, até aproximadamente os 100 segundos após o início do resfriamento, a superfície do corpo de prova Jominy fica sob tensões trativas na superfície e compressivas no núcleo, no que se refere às componentes axial e tangencial. Essa configuração se inverte nos instantes de tempo seguintes, de modo que na configuração do campo de tensões ao término do tratamento térmico tem-se tensões compressivas na superfície e trativas no núcleo, como evidencia a Figura 60.

CONCLUSÕES

Para a proposta 1, ainda que ausente a validação experimental, as simulações realizadas a partir da metodologia desenvolvida neste trabalho permitiram, as seguintes conclusões:

- A análise de elementos finitos foi capaz de explicar e reproduzir os fenômenos observados durante o processo de têmpera de um cilindro de aço. Em particular, os resultados numéricos indicam que a formação de martensita está geralmente relacionada a tensões compressivas (EBERT, 1978; BORTOLETO et al., 2008; RISSO et al. 2004; HARDIN e BECKERMANN, 2005)
- A incorporação aos modelos das transformações de fase da austenita em ferrita, bainita e perlita gera campos de tensão diferentes dos campos gerados pelas simulações que consideram unicamente a transformação martensítica. De acordo com a taxa de resfriamento, o centro do cilindro passará por uma expansão volumétrica, o que inverterá o campo de tensões. Em casos onde as transformações ferrítica, bainítica e perlítica ocorrem, o centro do cilindro ficará sob tensões compressivas, enquanto a superfície sob tensões trativas.
- Os resultados dos modelos concordam, de forma qualitativa, com os trabalhos de Pacheco et al. (2001a), Camarão (1998) e Hardin e Beckermann (2005), no que se refere ao desenvolvimento dos campos de tensões e, particularmente, em relação às frações volumétricas transformadas e às tensões originadas por cada uma das diferentes mudanças de fase que ocorrem durante os processos de têmpera.

Já em relação à implementação da segunda proposta de modelamento, que promove o cálculo das frações volumétricas na transformação de fase pela utilização de uma abordagem de resolução do problema termo-mecânico-microestrutural acoplado, as seguintes conclusões podem ser tomadas:

- A análise e o cálculo das expansões volumétricas e das tensões residuais geradas pelas transformações de fase mostraram-se eficientes, corrigindo a formulação do software de Elementos Finitos quando da consideração das transformações de fases nos aços.
- Quando se considera o efeito das tensões residuais térmicas e de transformação de fase, ao final do processo de tratamento térmico, uma proveta Jominy fica sob tensões trativas no núcleo e compressivas na superfície.

- A simulação com maior detalhamento da curva CRC do material (Proposta 2) apresentou resultados semelhantes aos medidos em ensaio experimental, de forma que houve uma aderência significativa entre os resultados simulados e experimentais, diferentemente dos modelos da Proposta 1 e, inclusive, em relação a modelos da literatura limitados à transformações isotérmicas.
- A predição dos níveis de dureza do material teve boa aderência em relação aos valores medidos experimentalmente, o que mostra a eficiência no uso das relações de Maynier et al. (1978).
- A avaliação experimental das distorções geométricas não se mostrou equivalente a medições experimentais de outros pesquisadores (Ramanathan e Foley (2001)) nem mostrou equivalência em relação aos cálculos numéricos. Entretanto, houve, para todos esses casos, correlação dos valores de máxima deformação da peça.
- O cálculo das frações volumétricas transformadas mostrou-se consistente e equivalente aos valores obtidos por microscopia quantitativa, dentro dos limites das incertezas de medição. Os valores estimados para as frações volumétricas, direta e indiretamente, foram utilizados para os cálculos das demais variáveis (dureza, distorção), de modo que a aderência entre os valores medidos e calculados para essas outras variáveis denotam a eficiência e correção do cálculo das transformações.
- Comparativamente, a Proposta 2, que aborda todas as relações relevantes do problema termo-mecânico-microestrutural, mostrou-se superior à Proposta 1, de abordagem simplificada. Isso evidencia a importância do acoplamento entre os diversos fenômenos presentes nos processos de tratamento térmico e a necessidade de uma abordagem que considere esses efeitos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANTUNES, A. E. B.; ANTUNES, L. M. D. *Comportamento plástico do aço inoxidável austenítico em baixa temperatura*. **Rev. Esc. Minas** [online], vol.60, n.1, pp. 141-147, 2007.
- ARGYRIS, J. H.; SZIMMAT, J.; WILLAM K. J. *Finite Element Analysis of arc-welding processes*. **Numerical Methods in heat transfer**, v. 111, pp. 1-34, 1985.
- ASM. **Atlas of Isothermal Transformation and Cooling Transformation Diagrams**, American Society for Metals, Materials Park, OH, 1977.
- ASM. **Metals Handbook**. 9.ed., American Society for Metals, Metals Park, 1990.
- ASM, Metals Handbook. **Introduction to Heat Treating of Tool Steels**, vol. 4, 1991.
- ASME **B31.1-1995**, An American National Standard, ASME Code for Pressure Piping, B31, 1995.
- ASTM. *Norma ASTM A255*. **Standard Test Methods for Determining Hardenability of Steel**. American Society for Testing and Materials, 1999.
- ASTM. *Norma ASTM E562*, **Standard Test Method for Determining Volume Fraction by Systematic Manual Point Count**, American Society for Testing and Materials, 2002.
- ATKINS, M. **Atlas of Continuous Cooling Transformation Diagrams for Engineering Steels**, American Society for Metals, Metals Park, Ohio, British Steel Corporation, Sheffield, England, pp. 145, 1980.
- AVRAMI, M. Kinetics of Phase Change. *I. General Theory*, **Journal of Chemical Physics**. Vol.7:, pp. 1103–1112, 1939.
- BERRAHMOUNE, M. R. *Transformation martensitique et rupture différée dans l'acier austénitique instable 301LN*. **Tese de doutorado**- Doctorat Mécanique et Matériaux, ENSAM, École Nationale Supérieure d'Arts et Métiers p.186., 2006.
- BHADESHIA, H.K.D.H. *Proceedings of the international solid-solid phase transformations conference*, Pittsburgh, p 1041, 1981.
- BHADESHIA, H.D.K.H. **Bainite in Steels (2nd edition)**, Cambridge, London, 2001.
- BHADESHIA, H.K.D.H. *Material factors*. In: **Handbook of Residual Stress and Deformation of Steel**, ASM International, eds G. Totten, M. Howes and T. Inoue, ASM International, Materials Park, Ohio, 2002.
- BOAG, J.M.; FLAMAN, M.T. HERRING, J.A. **Handbook of Residual Stress and Deformation**. ASM, p. 1-6, 2002.

BORGES, J. F. A.; PADILHA, A. F.; IMAKUMA K. *Determinação da Energia de Defeito de Empilhamento em Metais e Ligas com Estrutura Cúbica de Face Centrada por Difração de Raios-X. Publicação Ipen* 129; São Paulo, 1988. <http://www.ipen.br/biblioteca/ipen/1988/01625.pdf>

BOKOTA, A.; ISKIERKA, S. *Numerical Analysis of phase transformations and residual stresses in steel cone-shaped elements hardened by induction and flame methods. Int. J. Mech. Sci.*, v. 40, no. 6, pp. 617-629, 1998.

BORTOLETO, E. M.; LAGATTA, C. F.; CUPPARI, M. G. V.; MACHADO, I. F.; SOUZA, R. M. *Numerical Simulation of Residual Stresses in Quenched Steel Bodies Using Subroutines to Represent TTT and CCT Diagrams. Journal of ASTM International* (Online), v. 5, p. JAI101810, 2008.

CAHN, J. W. *The Kinetics Of Grain Boundary Nucleated Reactions, Acta Metallurgica*, Vol. 4, pp. 449-459, 1956.

CAHN, J. W. *The time cone method for nucleation and growth kinetics on a finite domain, Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 398, pp. 425-437, 1996

CALLISTER, W. D. **Ciência e Engenharia de Materiais: Uma Introdução**. 5ed., LTC, São Paulo, 2002

CAMARÃO, A. F. *Um modelo para previsão de tensões residuais em cilindros de aço temperados por indução. Tese de doutorado*, USP, 107 p., 1998.

CANALE, L.C.F; PENHA, R. N.; SARMIENTO, G.S.; TOTTEN, G.E. *Simulation of heat transfer properties and resulting residual stress analysis from cooling curves obtained from quenching studies*. In: **XIV Congresso e Exposição Internacional de Tecnologia da Mobilidade - SAE BRASIL**, 2005.

CHEN, J. *Modelling of Simultaneous Transformations in Steels. Tese de Doutorado*. Fitzwilliam College, 2009.

CHIAVERINI, V. **Tecnologia mecânica**. 2. ed. São Paulo, 1986.

CHUMBLEY, L.S. *Clean Cast Steel Technology: Determination Of Transformation Diagrams For Duplex Stainless Steel*, Iowa State University, **Report To The Department Of Energy and The Steel Founders' Society Of America**, 2005.

COLPAERT, P. H. **Metalografia dos Produtos Siderúrgicos Comuns**. 3. Ed. São Paulo: Editora Edgard Blücher Ltda., 1989.

CORET, M.; COMBESCURE, A. *A Mesomodel for the Numerical Simulation of the Multiphasic Behavior of Materials under Anisothermal Loading, International Journal of Mechanical Sciences*, vol. 44, pp.1947–1963, 2002.

DENIS, S.; GAUTIER, E.; BECK, G.; SIMON, A. *Stress-phase-transformation interaction, basics principle, modelling, and calculation of internal stresses*. **Materials Science and Technology**, 1985

DENIS, S.; FARIAS, D.; SIMON, A. *Mathematical model coupling phase transformation and temperature evolution in steels*, **ISIJ Int.**, Vol. 32, pp. 316, 1992.

DOBRZANSKI, A.; TRZASKA, J. *Application of neural networks for prediction of critical values of temperatures and time of the supercooled austenite transformations*, **J. of Materials Processing Technology**, pp.155–156, 2004.

DOBRZANSKI, A.; LESZEK, A.; TRZASKA, J. *Application of neural networks for the prediction of continuous cooling transformation diagrams*, **Computational Materials Science**, vol.30, pp. 251–259, 2004.

DOBRZANSKI, L.A.; TRZASKA, J. *Application of neural networks to forecasting the CCT diagrams*, **J. of Materials Processing Technology**, 157–158, pp. 107–113, 2004.

DOBRZANSKI, L.A.; TRZASKA, J.; *Modelling of CCT diagrams for engineering and constructional steels*, **Journal of Materials Processing Technology** 192–193, pp.504–510, 2007.

DUDÁS, Z. *Comparison of Measured Phase Volumes with Calculated ones Created by TTT-CCT Diagram Transformation*, **Materials Science Forum** Vols. 537-538, pp. 497-503, 2007.

EBERT, L. J. *The Role of Residual Stresses in the Mechanical Performance of Case Carburized Steels*, **Metall. Trans. A**, Vol. 9A, pp. 1537–1551, 1978.

EMBURY, J.D.; HAN, K. *A Survey of Processing Methods for High Strength-High Conductivity Wires for High Field Magnet Applications*, **Proc. Megagauss Magnetic Field Generation**, World Scientific, MGVIII, 147-153, 2004.

FLETCHER, R.; Price, R. F. *Generation of thermal stress and strain during quenching of low-alloy steel plates*. **Metals Technology**, pp. 427-446, 1981.

GANGHOFFER, J.E.; SIMONSSON, K.; DENIS, S.; GAUTIER, E.; SJOSTROM, S.; SIMON, A. *Martensitic transformation plasticity simulations by finite elements*, **Journal De Physique Iv**, Colloque C3, supplement au **Journal de Physique** 111, Vol 4, 1994.

GOZZI, D. S., *Estudo do Problema de Empenamento de Tarugos de Aço Provenientes de Lingotamento Contínuo*, **Dissertação de Mestrado**, Universidade de São Paulo, 2005.

HARDIN, R. A; BECKERMANN, C. *Simulation of Heat Treatment Distortion*, in **Proceedings of the 59th Technical and Operating Conference**, 2005.

HILDENWALL, B. *Prediction of the Residual Stresses Created During Quenching*, **Tese de Doutorado**, Linkoping University, 1979.

HUIPING L., GUOQUN Z., SHANTING N., CHUANZHEN H., *FEM simulation of quenching process and experimental verification of simulation results*, **Materials Science and Engineering A** 452–453, pp. 705–714, 2007.

INOUE, T.; TANAKA K. *An Elastic-Plastic Stress Analysis Of Quenching When Considering A Transformation*, **Int. J. Mech.** Sd. Pergamon Press. Vol. 17, pp. 361-367, 1975.

INOUE, T. *Macro-, Meso- and Micro-scopic Metallo-thermo-mechanics-Application to Phase Transformation Incorporating Process Simulation*, **Mater Sci Res Int**, Vol. 10, n°1, pp 1-11, 2004.

JIN, L., *Simulation of Quenching and Tempering of Steels*, **Tese de Doutorado**, Purdue University, 2001.

JOHNSON, W. A.; MEHL, R. F. *Reaction kinetics in process of nucleation and growth*. **Transactions of the American Institute of Mining, Metallurgical and Petroleum Engineers** 135 , pp. 410-458, 1939.

JUN, S.; ZHANG, H.; BECHHOEFER, J. *Nucleation and growth in one dimension. I. The generalized Kolmogorov-Johnson-Mehl-Avrami model*, **Physical Review - E** 71, 2005.

KANG, S.H.; IM, Y.T. *Finite element investigation of multi-phase transformation within carburized carbon steel*, **Journal of Materials Processing Technology**, vol. 183, pp 241–248, 2007.

KOISTINEN, P.P.; MARBURGER, R.E. *A General Equation Prescribing the Extent of The Austenite-Martensite Transformation In Pure Iron-Carbon Alloys And Carbon Steel*. **Acta Metallurgica**, v.7, pp.59-60, 1959.

KOLMOGOROV, A. *A statistical theory for the recrystallization of metals*. *Akad. nauk SSSR, Izv.*, **Ser. Matem.** 1: 355, 1937.

KOLMOGOROV, A.N. *Izv. Akad. Nauk. USSR-Ser. Matemat.* 1, p. 355, 1939.

LEBLOND, J. B.; MOTTET, G.; DEVAUX, J. C. *A Theoretical and Numerical Approach to the Plastic Behavior of Steels During Phase Transformation*, **J. Mech. Phys.**, Vol. 34, No. 4, pp. 411-432, 1986.

LEBLOND, J.; DEVAUX J.; DEVAUX J. *Mathematical modelling of transformation plasticity in steel i. case of ideal-plastic phases*. **International Journal of Plasticity**, Vol. 5, pp, 551-572, 1989.

LEBLOND, J. B. E; DEVAUX, J. *A new kinetic model for anisothermal metallurgical transformations in steels including effect of austenite grain size*. **Acta metall.** Vol. 32, No. 1, pp. 137-146, 1984.

LU, J.. **Handbook of Measurement of Residual Stresses**, 254 p., 1996.

LEE, S. J.; LEE, Y.K. Finite element simulation of quench distortion in a low-alloy steel incorporating transformation kinetics. **Acta Materialia**, 56. pag. 1482–1490, 2008.

LEE, S. J.; PAVLINA E.J.; VAN TYNE C.J, Kinetics Modeling of Austenite Decomposition for an End-Quenched 1045 Steel, **Materials Science and Engineering A**, 2010.

LISPIX, Disponível em: <http://www.nist.gov/lispix/>. Acessado em 05 de julho de 2010.

MARTINS, M. *Temperabilidade Jominy e influência do revenido sobre a dureza – um estudo em aços estruturais nacionais*. **Dissertação de Mestrado**, Universidade Federal De Santa Catarina, 2002.

MAYNIER, P.; DOLLET, J.; BASTIEN P. Hardenability concepts with applications to steels, **AIME**, New York, NY: 518, 1978.

MELANDER, M. *Computer predictions of progressive induction hardening of cylindrical components*. **Mater. Sci. Technol.**, vol. 1, pp. 877–882, 1985a.

MELANDER, M. *Theoretical and Experimental Study of Stationary and Progressive Induction Hardening*, **J Heat Treating**, Vol. 2, pp. 145–165, 1985b.

MELANDER, M. *A Computational and Experimental Investigation of Induction and Laser Hardening*, **Tese de Doutorado**, Department of Mechanical Engineering, Linköping University, 1985c.

OLIVEIRA, M. F.; ZOBY, M. R. G.; SOUZA, R. M. *Simulação da Evolução de Tensões Térmicas em Cilindros de Laminação*, **Congresso Brasileiro Mecânica**, COBEM 2001, Brasil, 2001.

OLSON, G.B.; COHEN, M. *A mechanism for the strain-induced nucleation of martensitic transformations*. **J. Less-Common Met.** Vol.28, pp. 107–118, 1972.

PACHECO, P.M.C.L.; SAVI, M.A.; CAMARÃO, A.F. *Analysis of residual stresses generated by progressive induction hardening of steel cylinders*, **The Journal of Strain Analysis for Engineering Design**, Vol. 36, Number 5, pp. 507-516, 2001a.

PACHECO, P. M. C. L.; SILVA, E. P.; SAVI, M. A.; SOEIRO, F. J. C. P. *Minimização de Tensões Residuais Geradas pelo Processo de Têmpera em Aços - IV Encontro de Modelagem Computacional*, pp. 90-99. , 2001b.

PACHECO, P. M. C. L.; SILVA, E. P.; SAVI, M. A. *On The Thermo-Mechanical Coupling in Austenite-Martensite Phase Transformation Related to the Quenching Process*. **International Journal of Solids and Structures**, v. 41, n.3-4, p. 1139-1155, 2004.

PACHECO, P. M. C. L.; SILVA, E. P.; SAVI, M. A. *Finite element analysis of the phase transformation effect in residual stresses generated by quenching in notched steel cylinders*, **J. Strain Analysis**, Vol. 40, No. 2, 2005.

PACHECO, P. M. C. L.; SOUZA, L. F. G. *Modeling of quenching process in steel cylinders*, **Mechanics of Solids in Brazil**- Brazilian Society of Mechanical Sciences and Engineering, 2007.

PADILHA, A.F.; AMBROZIO FILHO, F. **Técnicas de Análise Microestrutural**, Hemus Editora Limitada, São Paulo, 190 páginas, 1985.

PAIVA, P.; SAVI, M.A.; PACHECO, P.M.C.L. *Modelos constitutivos para ligas com memória de forma*. **2º Congresso Temático de Aplicações de Dinâmica e Controle (SBMAC)**, 2003.

PEULTIER, B.; BENZINEB, T.; PATOOR, E. *Modelling of the martensitic phase transformation for finite element computation*, **Journal De Physique IV - France** 115, pp. 351–359, 2004.

POLLACK, H. W., **Material Science and Metallurgy**, (4th. Ed.). Prentice-Hall, New Jersey, 1988.

RALLS, K.M.; COURTNEY, T. H; WULFF J. **An introduction to Materials Science and Engineering**. p. 361., John Wiley & Sons, New York, 1976.

RAMANATHAN, R.; FOLEY, R.P. **Effect of prior microstructure on austenite decomposition and associated distortion**, Report, Illinois Institute of Technology, 2001.

REED-HILL, R. E., **Princípios de Metalurgia Física**, Guanabara Dois, 1982.

REYES, J. L. T.; GARCÍA, L. C. F.; COBOS, O. F. H. *Simulación Térmica en Cosmosworks de un acero sometido a un Ensayo de templabilidad Jominy*, **Scientia et Technica**, Vol. XIII Issue: 35 pp.231-236, 2007.

RISSO, J.; CARDONA, A.; ANCA, A. *A Simplified Model for Heat Treatment Simulation*, **14º Congreso sobre Métodos Numéricos y sus Aplicaciones**, Argentina, 2004.

ROUX, G.; BILLARDON R. *Numerical Prediction of residual stresses induced by multi-pass GTA welding of martensitic steel X10CrMoVNb9-1*, **18ème Congrès Français de Mécanique** (Grenoble 2007), France, 2007.

SARMIENTO, G. S. *Ultimos Avances En La Simulación Computacional De Tratamientos Termicos De Piezas De Acero Con Abaqus y Ht-Mod*, **XIV Congreso sobre métodos numéricos y sus aplicaciones**, Argentina, 2004.

SARMIENTO, G. S; LAURO, P.; *Análisis de las Microestructuras, Distorsiones y Tensiones Residuales en una Pieza de Acero Sometida a un Temple por Inmersión. Tercera Reunión Argentina de Usuarios de Abaqus*, 2002.

SEN, S.; AKSAKAL, B.; OZEL, A. *Transient and residual thermal stresses in quenched cylindrical bodies*, **International Journal of Mechanical Sciences**, v. 42, pp. 2013-2029, 2000.

SERANTONI, C. R. *Fadiga Térmica de Ferros Fundidos Brancos Multicomponentes*, **Dissertação de Mestrado**, EPUSP, 2003.

SHI W., YAO K., CHEN N., WANG H. *Experimental Study of Microstructure Evolution during Tempering of Quenched Steel and Its Application*; **Transac. of Materials and Heat Treatment** - Proceedings Of The 14th IFHTSE Congress, Vol. 25, 2004.

SILVA, E. P.; SAVI, M. A.; SOEIRO, F. J. C. P.; PACHECO, P. M. C. L. *Minimização de Tensões Residuais Geradas pelo Processo de Têmpera em Aços - IV Encontro de Modelagem Computacional*, pp. 90-99. , 2001.

SJÖSTRÖM, S. – *Interactions and constitutive models for calculating quench stress in steel*. **Materials Science and Technology**, v. 1, pp. 823-828, 1985.

SKLYUEV, P. V. *Equations for calculating the transformation temperatures of austenite*, **Metal Science and Heat Treatment**, Vol. 9, Number 3, 1967.

STEVENS, P. G.; IVENS, K. P.; Harper, P. *Increasing work-roll life by improved roll-cooling practice*, **Journal of the Iron and Steel Institute**, pp. 1-11, 1971.

SURM, H.; KESSLER, O.; HUNKEL, M.; HOFFMANN, F.; MAYR, P., *Modelling the ferrite/carbide _ austenite transformation of hypoeutectoid and hypereutectoid steels*, **J. Phys. IV France**, vol. 120, pp.111-119, 2004.

TEIXEIRA, M.G., *Análise Numérica por Elementos Finitos de Tensões Residuais Geradas por Mudança de Fase em aços Tratados Termicamente. Tese de doutorado*, PUC-Rio, Rio de Janeiro, 2002.

TOTTEN G. E.; HOWES; M. A., **Steel Heat Treatment Handbook**, 1997.

TSCHIPTSCHIN, A. P.; GOLDENSTEIN, H. **Aços e Ferros Fundidos Resistentes ao Desgaste**. São Paulo: Fabrica De Aços Paulista, 35 p, 1983.

TSCHIPTSCHIN, A. P.; GOLDENSTEIN, H.; SINATORA, A. **Metalografia dos Aços**, São Paulo.- Associação Brasileira De Metais, 1988.

UNTERWIESER, P. M.; HOWARD E. B., JAMES J. K, **Heat Treaters Guide: Standard Practices and Procedures for Steel**, ASM International, ISBN 0-87170-141-3, 493 pages, 1982.

WANG, K.F.; CHANDRASEKAR, S.; YANG, H.T.Y. *Experimental and computational study of the quenching of carbon steel*, **Journal of Manufacturing Science and Engineering**. Vol. 119, pp. 257-265, 1997.

WASILEVSKI, R.J. *On the Nature of the Martensitic Transformation*, **Metallurgical Transactions**, v.6A, pp. 1405-1418, 1975.

WOODARD, P.; CHANDRASEKAR, S.; YANG, H. *Analysis of Temperature and Microstructure in the Quenching of Steel Cylinders*, **Metallurgical And Materials Transactions B**, Vol. 30B, pp.815-822, 1999.

YE, J. S.; CHANG, H. B. E.; HSU, T. Y. *A Kinetics Model of Isothermal Ferrite and Pearlite Transformations under Applied Stress*, **ISIJ International**, Vol. 44, No. 6, pp. 1079–1085, 2004.

**ANEXO A – Desenho de fabricação do corpo de
prova Jominy adaptado para instrumentação
por termopares**