

APLICAÇÃO DE SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL NA DETERMINAÇÃO DE DIAGRAMA TTT DE RECOZIMENTO DE RECRISTALIZAÇÃO PARA UM AÇO BAIXO CARBONO

J. M. Á. de Paula⁽¹⁾

J. I. de Sousa⁽¹⁾

G. L. Faria⁽¹⁾

⁽¹⁾Campus Universitário do Morro do Cruzeiro, Bauxita.

Ouro Preto-MG, CEP:35400-000

Universidade Federal de Ouro Preto

Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais

RESUMO

Aços conformados a frio são, em geral, submetidos a um processo de tratamento térmico denominado de recozimento de recristalização visando restituir, total ou parcialmente, as propriedades mecânicas e físicas anteriores a deformação, bem como produzir outras alterações microestruturais indispensáveis para muitas aplicações. Como esse tratamento é amplamente utilizado nas indústrias siderúrgicas do mundo e seu uso demanda tempo e gera custos, pesquisadores têm estudado formas de aplicá-lo da maneira mais eficiente possível. Nesse contexto, estabelecer antecipadamente as melhores condições de temperatura e tempo para atingir a fração de grãos recristalizados pretendida a dado grau de deformação é algo que pode proporcionar grandes benefícios à operação. Diante dessa situação, esse trabalho criou, através de poucos dados experimentais e curvas cinéticas de recristalização geradas por simulação computacional, diagramas TTT (temperatura, tempo e fração de grãos recristalizados) de recristalização para um aço baixo carbono submetido a diferentes graus de deformação. Pôde-se observar que esses diagramas poderão ser utilizados como ferramentas capazes de fornecer a evolução temporal da recristalização para um conjunto de possíveis temperaturas de tratamento, possibilitando assim, prever condições propícias a um controle mais eficaz do processo e conseqüentemente uma redução no número de amostras ensaiadas.

Palavras-chave: *Simulação Computacional, Diagramas TTT, Cinética de Recristalização, Tratamento Térmico, Recozimento de Recristalização.*

1 INTRODUÇÃO

Os processos de conformação mecânica a frio adequam as dimensões e a forma dos materiais metálicos por meio de deformação plástica. Essas modificações são acompanhadas de alterações microestruturais que consistem na mudança de morfologia dos grãos, aumento da densidade de descontinuidades pontuais, lineares e superficiais (encruamento).

Como consequência, propriedades como limites de escoamento, de resistência à tração e dureza, se elevam em relação ao estado inicial, em detrimento da diminuição de outras, como ductilidade e tenacidade. O tratamento térmico de recozimento de recristalização é normalmente aplicado sobre o metal encruado para reajustar a microestrutura e as propriedades do material ⁽¹⁻⁸⁾.

Para quantificar a evolução temporal da recristalização de grãos em metais encruados, Avrami propôs um modelo (Eq. A), que descreve a cinética de evolução isotérmica de um grande número de sistemas a partir de ajustes dos parâmetros K, n e do t (tempo) ⁽⁶⁻¹¹⁾.

$$Y = 1 - \exp(-K.t^n) \quad (A)$$

A constante K é diretamente proporcional à velocidade de recristalização do sistema, e é fortemente dependente da temperatura de tratamento isotérmico. A Eq. B apresenta a lei que rege a relação $K=K(T)$ como sendo do tipo Arrhenius, na qual A é uma constante, E é a energia de ativação, R a constante universal dos gases e T a temperatura em Kelvin ⁽¹²⁾.

$$K(T) = A \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (B)$$

Pelo fato da determinação experimental destas constantes demandarem um número relativamente grande de ensaios, recentemente pesquisadores estão avaliando a aplicação de simulação computacional para prever a cinética de recristalização de materiais metálicos. Bing Fang et al. ⁽¹³⁾ estabeleceu dois modelos de fração volumétrica recristalizada dinamicamente durante passes de laminação. Reyes-Calderón et al. ⁽¹⁴⁾ empregou métodos de regressão linear e análises metalográficas para determinar a evolução da microestrutura em aços micro-ligados TWIP. Julien De Jaeger et al. ⁽¹⁵⁾ propôs um modelamento numérico com o intuito de investigar a recristalização dinâmica e o comportamento da microestrutura de super ligas de níquel Inconel 718 durante processo de forjamento. Yu Fu e Hao Yu ⁽¹⁶⁾ também efetuaram estudos para determinar comportamento da microestrutura deformadas em altas temperaturas, através de modelamentos matemáticos.

Neste contexto, com o objetivo de propor uma ferramenta para auxiliar na parametrização das condições de tratamentos isotérmicos de recozimento de recristalização em aços em desenvolvimento com rota de tratamento ainda não estabelecida industrialmente, este trabalho apresenta uma metodologia que

emprega um pequeno número de experimentos de recozimento de recristalização associado a simulação computacional para obter curvas cinéticas de recristalização que ajudaram a criar um diagrama que relaciona temperatura, tempo e fração de grãos recristalizados (TTT) para um aço baixo carbono submetido a um grau de deformação específico.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Materiais

Para a realização deste trabalho foram utilizadas chapas de aço SAE 1010. A composição química do aço estudado é a apresentada na Tab. 1.

Tabela 1 - Composição química do aço utilizado neste estudo (% em peso).

COMPOSIÇÃO QUÍMICA (% EM PESO)			
C	S	Mn	P
0,117	0,003	0,401	0,018

2.2 Procedimentos Experimentais

O fluxograma apresentado pela Fig. 1 indica as etapas iniciais do trabalho, que consistiram em um estudo experimental cinético do aço em questão em condições específicas de deformação e recristalização.

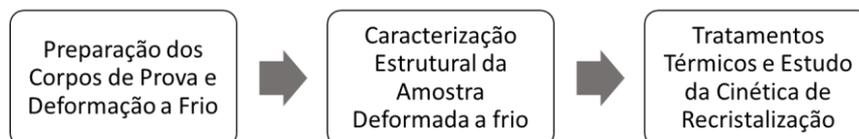


Figura 1 - Fluxograma apresentando as etapas para obtenção da cinética de recristalização do aço SAE1010.

Os corpos de prova foram confeccionados e submetidos a uma caracterização do estado de entrega, por meio de ensaio de microdureza Vickers, com carga de 10gf e tempo de ensaio de 5 segundos. Após isto, estes corpos de prova passaram pelo processo de laminação a frio em escala piloto, adotando-se um grau de deformação de 87%. Novamente a amostra foi submetida a ensaios de microdureza Vickers. Por fim, estas amostras foram submetidas a um tratamento térmico de recozimento de recristalização, uma a 600°C e a outra a 700°C.

Para cada temperatura, as amostras foram tratadas por diferentes intervalos de tempo (1, 2, 3, 5, 8, 10, 13, 15 e 30 minutos) tendo sua microdureza Vickers medida para cada condição. Com base nos dados obtidos, foi proposto um modelo que

caracterizou a cinética de recristalização da liga em estudo, calculando-se os valores de k e n do modelo de Avrami, juntamente com a energia de ativação.

No modelo de Avrami, o parâmetro n está associado à morfologia dos primeiros núcleos que se formam. Nesse trabalho, pôde-se observar que os valores deste parâmetro determinados experimentalmente (600°C e 700°C) se aproximavam sistematicamente de 1. Segundo a literatura, o parâmetro n pode ser considerado 1 quando o mecanismo de nucleação se dá em contornos de grãos⁽¹⁷⁾.

Os demais parâmetros (E e A), obtidos neste trabalho, por meio dos experimentos a 600°C e 700°C, foram adotados para outras possíveis temperaturas de tratamento. Isto é possível baseando-se no fato de que eles são função da composição química e do grau de deformação do material.

Com a utilização destas constantes, o Modelo de Avrami foi aplicado, por meio de processos iterativos computacionais, para gerar um conjunto de curvas cinéticas que representam o comportamento da recristalização do material em diversas temperaturas de tratamento (500°C, 525°C, 550°C, 575°C, 600°C, 625°C, 650°C, 675°C, 700°C, 725°C e 750°C).

A simulação foi desenvolvida no MATLAB, versão R2013a. Uma representação do algoritmo introduzido no *software* está apresentada Fig. 2.

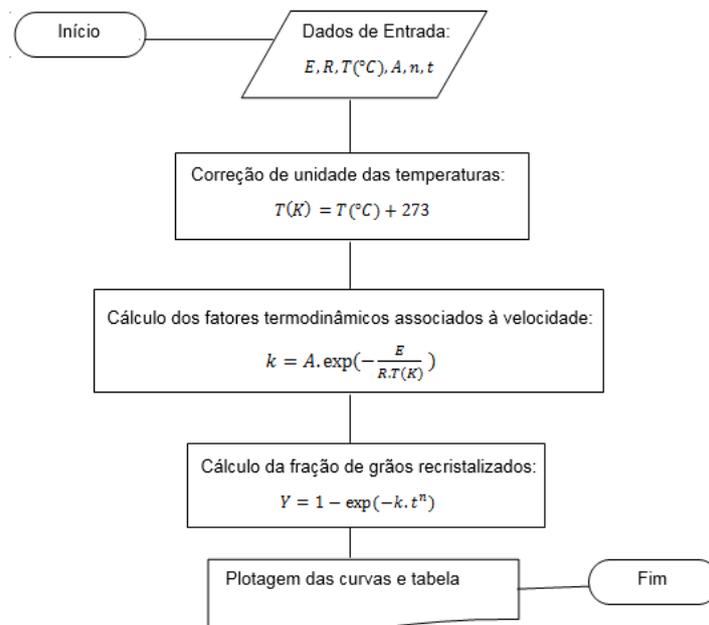


Figura 2 - Fluxograma representando as etapas seguidas pelo algoritmo para a obtenção das curvas cinéticas de recristalização e a tabela contendo os tempos de início e fim da recristalização para um aço SAE 1010 deformado 87%.

Por meio da análise dos dados gerados na simulação, foi possível determinar as porcentagens recristalizadas em função do tempo e das temperaturas de tratamento térmico. Os intervalos de tempo de início de recristalização foram definidos como sendo os instantes em que 1% da microestrutura do material estava recristalizada. De forma semelhante, os intervalos de tempo de fim de recristalização foram definidos como sendo os instantes em que 99% da microestrutura já estava recristalizada.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Determinação Experimental de Constantes Cinéticas

Amostras do aço inicialmente deformadas e submetidas aos diferentes intervalos de tempo de tratamento térmico de recozimento de recristalização nas temperaturas de 600°C e 700°C foram submetidas aos ensaios de microdureza. A partir da aplicação de um modelo da regra da alavanca⁽¹²⁾, foi possível que curvas do tipo fração de grãos recristalizados versus tempo fossem obtidas (Fig. 3). Ajustes não lineares foram aplicados nos dados experimentais e os valores de K e n foram calculados a partir da Eq. (A).

Para a obtenção da energia de ativação, utilizou-se a Eq. (B) aplicada aos dados de K(T) obtidos para as temperaturas de 600°C e 700°C. A Tab. 2 apresenta os resultados obtidos.

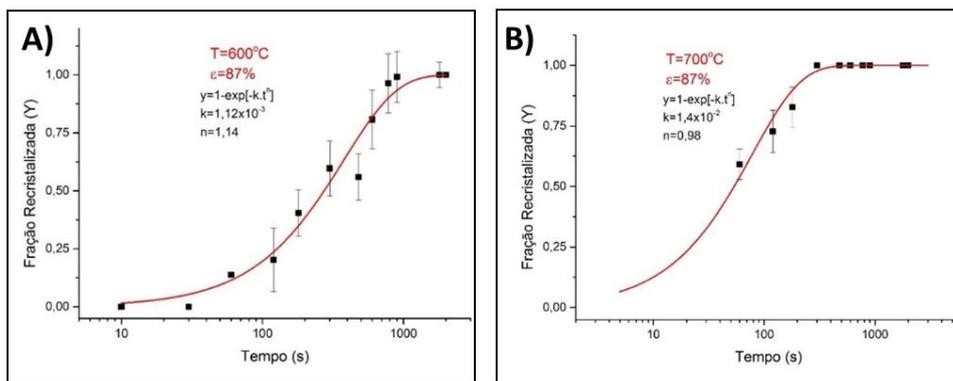


Figura 3 - Fração recristalizada versus tempo de tratamento para o aço SAE 1010. A) temperatura de tratamento de 600°C; B) temperatura de tratamento de 700°C.

Tabela 2 - Resultados obtidos para as constantes características.

Aço SAE 1010 deformado 87%				
Temperatura (°C)	E (kJ)	A	n	K
600°C	178,4	527x10 ⁵	1,14	1,12x10 ⁻³
700°C	178,4	527x10 ⁵	0,98	1,4x10 ⁻²

3.2 Avaliação da Representatividade da Constante K determinada por processos iterativos

Com o objetivo de verificar a representatividade dos valores de K determinados por processos iterativos da simulação, uma curva $\ln(K)$ versus $1/T$ foi traçada. Na Fig. 4 pode-se observar que a relação entre a ordenada e a abcissa é linear, indicando que os valores de K obtidos, realmente respeitam a equação de Arrhenius.

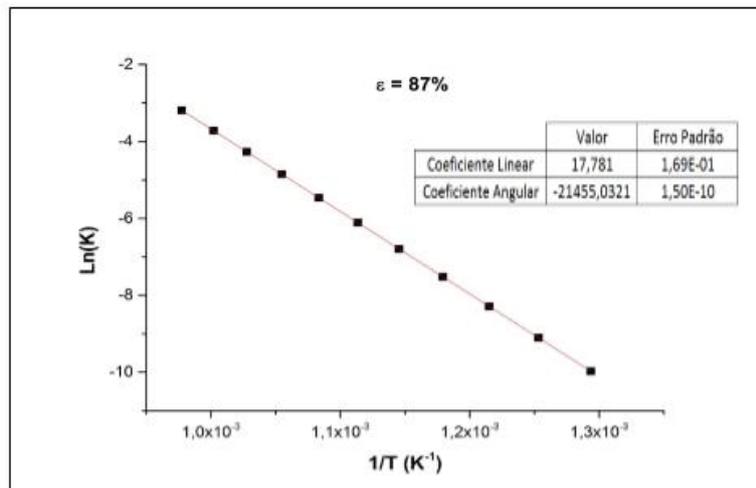


Figura 4 - Relação entre as constantes cinéticas (K) obtidas por meio da simulação, e as temperaturas de tratamento térmico de recozimento de recristalização (T).

3.3 Curvas Cinéticas de Recozimento de Recristalização

Após a obtenção dos valores de K por meio de simulações computacionais, foram obtidos os dados de fração recristalizada em função do tempo, para os valores de $n=1,14$ e $n=0,98$ (dados obtidos experimentalmente) e $n=1$ (aproximação teórica). As Fig. 5, Fig. 6 e Fig. 7 apresentam, respectivamente, os resultados obtidos.

De forma geral, o comportamento dessas curvas seguiu o que era esperado. Verifica-se um comportamento sigmoidal e o aumento da velocidade de recristalização com o aumento da temperatura de tratamento ⁽¹²⁾.

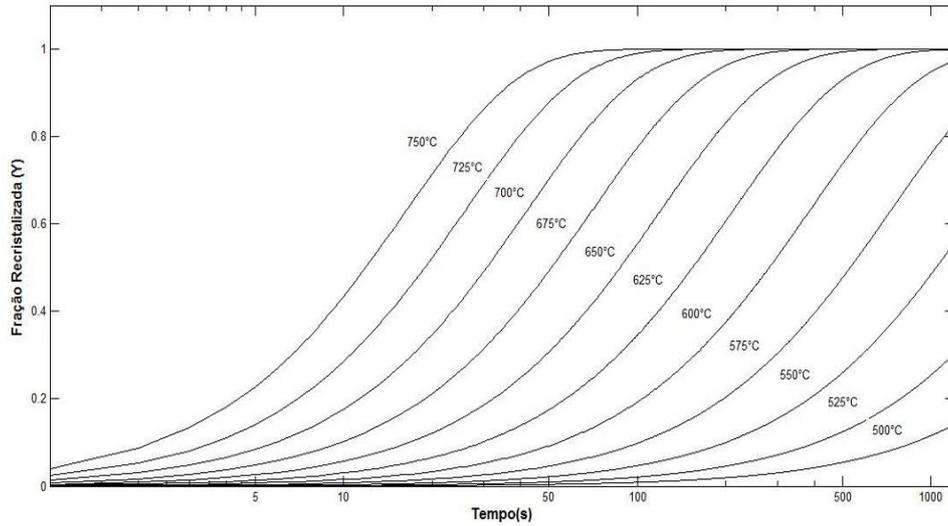


Figura 5 - Curva Cinética de Recristalização gerada por simulação computacional para um aço SAE 1010 deformado 87% considerando $n=1,14$.

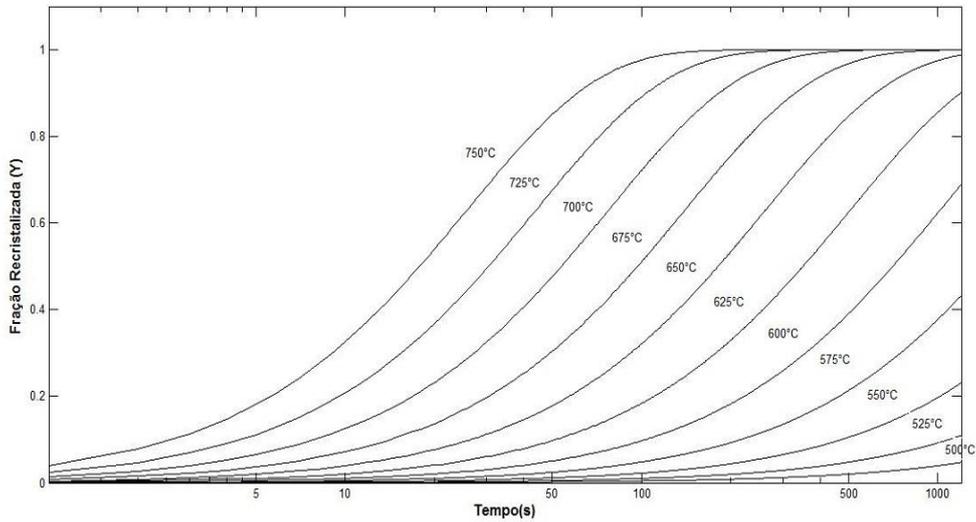


Figura 6 - Curva Cinética de Recristalização gerada por simulação computacional para um aço SAE 1010 deformado 87% considerando $n=0,98$.

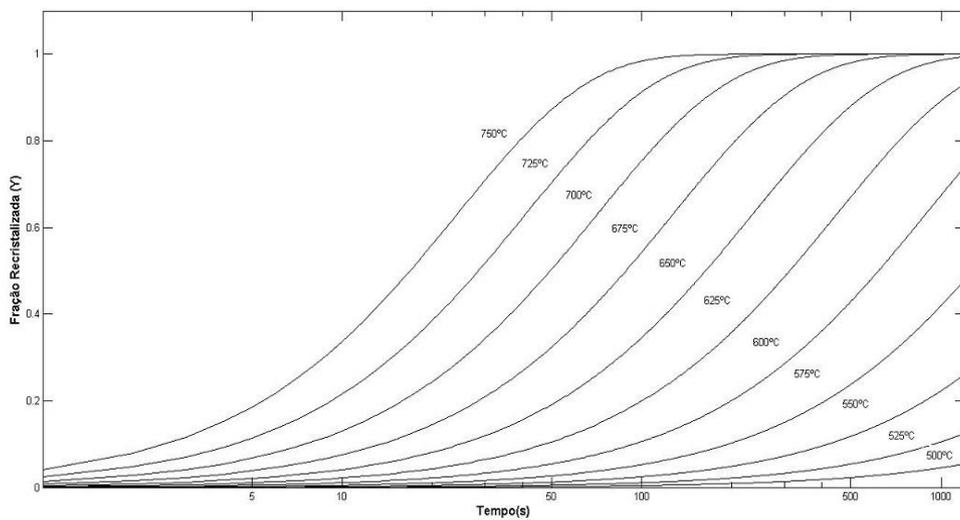


Figura 7 - Curva Cinética de Recristalização gerada por simulação computacional para um aço SAE 1010 deformado 87% considerando $n=1$.

Após a análise dos dados de cinética de recristalização, pode-se inferir que os dados utilizados na simulação coincidem com a análise experimental realizada para o aço SAE1010 deformado com um grau de 87%. Verifica-se também que para temperaturas relativamente baixas, mesmo para longos períodos de tratamento isotérmico, a fração de grãos recristalizados é muito pequena, inviabilizando a aplicação industrial destas temperaturas. Isto ocorre devido à temperatura de tratamento estar abaixo da temperatura crítica de recristalização.

3.4 Diagrama TTT de Recozimento de Recristalização

A Fig. 8 apresenta um diagrama TTT de recozimento de recristalização construído por meio dos dados de simulação computacional, considerando o parâmetro $n=1$. Pode-se observar que o objetivo inicial proposto foi alcançado, uma vez que o diagrama apresenta características que obedecem às clássicas leis de recristalização. Nota-se que para uma deformação constante, quanto maior a temperatura de tratamento isotérmico, menor é o tempo necessário para a etapa de nucleação dos grãos recristalizados, assim como para a completa recristalização ⁽¹²⁾.

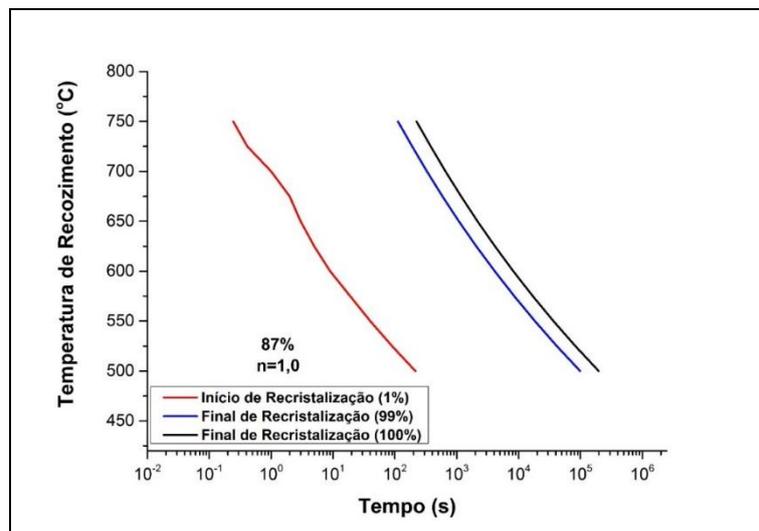


Figura 8 - Diagrama TTT (transformação, temperatura, tempo) de recozimento de recristalização para um aço SAE 1010 deformado 87%.

Percebe-se que, enquanto são necessários aproximadamente 1100 segundos (18,3 minutos) para que 99% da microestrutura do aço em questão se recristalize a uma temperatura de 650°C, para que a mesma amostra tenha 99% de sua microestrutura recristalizada, a uma temperatura de 750°C, são necessários apenas 112 segundos (1,9 minutos). Deve-se destacar que os intervalos de tempo

abordados nesta discussão têm início a partir do momento em que as amostras de aço já tenham atingido o encharque.

3.5 Influência da Morfologia dos Núcleos

Com base na teoria de nucleação ⁽¹⁷⁾, presumiu-se que a aproximação de $n=1$ não acarretaria em uma disparidade entre o valor teórico e os valores experimentais, porém, como pode ser percebido na Fig. 9, há uma diferença entre esses valores para tempos de início e fim da recristalização.

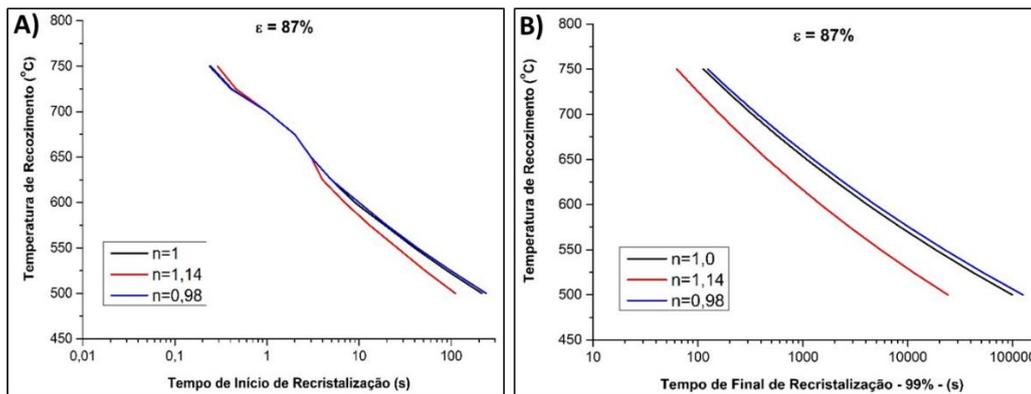


Figura 9 - Influência dos parâmetros associados à morfologia dos núcleos (n) no A) início da recristalização; B) fim da recristalização.

Nota-se na Fig. 9 que há, tanto para o início quanto para o final da recristalização, uma pequena diferença nos intervalos de tempo. Percebe-se que, à medida que a temperatura de tratamento é reduzida, mais significativo é este efeito. Isso é coerente pois, para temperaturas inferiores, o fenômeno de nucleação é desfavorecido e verifica-se intervalos de tempo de recristalização maiores. Os pontos preferenciais e a morfologia dos núcleos são afetados, assim sendo, a aproximação de $n=1$ (núcleos esféricos originados nos contornos de grãos encruados) pode se afastar mais das condições reais de nucleação dos novos grãos ⁽¹⁷⁾.

Entretanto, para fins de orientação de processos industriais, que possuem outras variáveis de difícil controle que podem gerar dispersões muito maiores, esta diferença entre o n determinado experimentalmente e o aproximado, não representa um problema significativo, podendo esta metodologia proposta ser empregada. Por exemplo, para a temperatura de 750°C, com $n=1$, os intervalos de tempo de início e final de recristalização são, respectivamente, 0,25 segundos (0,0042 minutos) e 112 segundos (1,9 minutos). Para $n=1,14$, o início e o final da recristalização se dão, respectivamente, em 0,26 segundos (0,0043 minutos) e 65 segundos (1,1 minutos).

4 CONCLUSÕES

O algoritmo utilizado na simulação computacional foi capaz de criar as curvas cinéticas de recristalização para as amostras do aço estudado, logo atendeu o objetivo proposto.

A relação $\ln(K)$ se mostrou linear com $1/T$, este fato prova que as constantes obtidas atenderam à Equação de Arrhenius. Dessa forma, os valores de K gerados foram coerentes para a determinação da fração de grãos recristalizados.

Os dados de simulação computacionais gerados com os valores de n reais convergiram para os resultados encontrados experimentalmente. Logo o modelo proposto no trabalho está validado.

A aproximação do parâmetro $n=1$ pode acarretar em desvios no tempo de tratamento, porém esses desvios não são grandes quando comparados com a utilização de valores de n obtidos experimentalmente. Dessa forma, os diagramas TTT de recozimento de recristalização originados por simulação computacional podem fornecer boas estimativas para a determinação dos tempos de início e fim de recristalização.

5 REFERÊNCIAS

- 1 BELADI, H. and HODGSON, P.D. Effect of carbon content on the recrystallization kinetics of Nb-steels. *Scripta Materialia*. 2007; 56: 1059-1062.
- 2 MARSHALL, G. J. e RICKS, R. A. Role of iron during recovery and recrystallisation of aluminium-iron alloys. *Material Science Forum*, v. 113-115, p. 245-250, 1993.
- 3 LIN, Y.C., CHEN, Ming-Song, ZHONG, J. Study of static recrystallization kinetics in a low alloy steel. *Computational Materials Science*. 2008; 44: 316-321.
- 4 RAJI N. A., OLUWOLE O. O. Recrystallization Kinetics and Microstructure Evolution of Annealed Cold-Drawn Low-Carbon Steel. *Journal of Crystallization Process and Technology*. 2013; 3: 163-169.
- 5 GUERENU, A. M., ARIZTI, F., FUENTES, M. D., GUTIERREZ, I. Recovery during annealing in a cold rolled low carbon steel. Part I: Kinetics and microstructural characterization. *Acta Materialia*. 2004; 52: 3657-3664.

- 6 LOW, M. Determinação do Estágio Inicial da Recristalização em Ligas de Alumínio por Difração de Raios-X. 92f. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear-Materiais) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 2002.
- 7 YE, W., LE GALL, R., SAINDRENAN, G. A study of the recrystallization of an IF steel by kinetics models. *Materials Science and Engineering*. 2002; A332: 41-46.
- 8 LIMA, E. P. R. Estudo da cinética de recristalização das ligas de alumínio AA 8011 na condição H18. 2002. 92f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola de Engenharia, Universidade Federal de Pernambuco. Recife, 2002.
- 9 OYARZABAL, M., MARTINEZ-DE-GUERENU, A., GUTIERREZ, I. Effect of stored energy and recovery on the overall recrystallization kinetics of a cold rolled low carbon steel. *Materials Science and Engineering*. 2008; A485: 200-209.
- 10 GUERENU, A. M., ARIZTI, F., GUTIERREZ, I. Recovery during annealing in a cold rolled low carbon steel. Part II: Modelling the kinetics. *Acta Materialia*. 2004; 52: 3665-3670.
- 11 GUERENU, A. M., ARIZTI, F., GURRUCHAGA, K. Nondestructive characterization of recovery and recrystallization in cold rolled low carbon steel by magnetic hysteresis loops. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2007; 316: e842-e845.
- 12 PAULA, J. M. Á. D. Avaliação da Possibilidade Aplicação da Técnica de DSC na Determinação da Temperatura de Recristalização de um Aço Baixo Carbono. Monografia de Final de Curso. 2014.
- 13 FANG, B., JI, Z., LIU, M., TIAN, G., JIA, C., ZENG, T., HU, B., CHANG, Y. Critical strain and models of dynamic recrystallization for FGH96 superalloy during two-pass hot deformation. *Materials Science & Engineering A*. 2014; 593: 8-15.
- 14 CALDERON, F. R., MEJIA, I., CABRERA, J. M. Hot deformation activation energy (Q_{HW}) of austenitic Fe-22Mn-1.5Al-1.5Si-0.4C TWIP steels microalloyed with Nb, V, and Ti. *Materials Science & Engineering A*. 2013; 562: 46-52.
- 15 DE JAEGER, J., SOLAS, D., FANDEUR, O., SCHMITT, JH., REY, C., 3D numerical modeling of dynamic recrystallization under hot working: Application to Inconel 718. *Materials Science & Engineering A*. 2015; 646: 33-44.
- 16 YU, H., FU, Y. Application of mathematical modeling in two stage rolling of hot rolled wire rods. *Journal of Materials Processing Technology*. 2014; 214: 1962-1970.

- 17 CHRISTIAN, J. W. The Theory of Transformations in Metals and Alloys. Elsevier Science Ltd. 2002.

ABSTRACT

Cold-formed steels are, in general, submitted to a heat treatment process named recrystallization annealing, which aims to restore, totally or partially, the mechanical and physical properties prior to deformation, as well as to produce other necessary microstructural modifications for many applications. As this treatment is widely used in steel work industries around the world, and its use demands time and generate costs, researchers have studied ways to apply it with more efficiency. In this context, the prediction of the best conditions of annealing temperature and time in order to accomplish the desired recrystallized grain fractions for certain previous strain degree is something that can provide huge benefits for the operation. Facing this situation, this work has created, through experimental data and kinetic curves of recrystallization generated through computational simulation, TTT diagrams (temperature, time and fraction of recrystallized grains) of recrystallization for a low carbon steel submitted to different strain grades. It was possible to observe that these diagrams can be used as an important tool to provide the temporal evolution of recrystallization as a function of the heat treatment temperatures, enabling, this way, to predict prosperous conditions to obtain high efficiency in the process control and, consequently, a decrease in the number of analyzed samples.

Key-words: *Computational Simulation, TTT Diagrams, Kinetics of Recrystallization, Heat Treatment, Recrystallization Annealing.*