

Projeto de Pesquisa

**MODELAMENTO COMPUTACIONAL DOS CICLOS TÉRMICOS DE
FORJAMENTO DE UM AÇO INOXIDÁVEL SUPERDÚPLEX E SUA
VALIDAÇÃO EXPERIMENTAL**

Proponente: Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco

rodrmagn@fei.edu.br

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica

Área de concentração: Materiais e Processos

Centro Universitário FEI

Fundação Educacional Inaciana Pe. Sabóia de Medeiros

Candidata à bolsa: Mariana Tortella Merli Fiorante

ma_fiorante@hotmail.com

01 de outubro de 2018

RESUMO

O presente projeto tem por objetivo realizar a simulação computacional da cinética de transformação de fases dos ciclos térmicos de forjamento de um aço inoxidável superdúplex, ou seja, durante o aquecimento do material a diferentes taxas a partir da temperatura ambiente, na condição microestrutural inicial de 50% de ferrita e 50% de austenita, até 1250°C, temperatura típica de forjamento, em diferentes tempos de patamar nesta temperatura, e na sequência no resfriamento em diferentes taxas, com a presença ou não de patamar de solubilização, utilizando-se o software DICTRA. Pretende-se avaliar na simulação a evolução das frações volumétricas das fases, para posterior validação experimental em laboratório de parte dos resultados destas simulações, realizando os ciclos térmicos e caracterizando as microestruturas formadas. Os dados de entrada para as simulações serão composição química e tamanho das fases, temperatura e taxa de aquecimento e resfriamento, base de dado termodinâmica TCFE8 e base de dado de mobilidade atômica MOBFE3, obtendo-se resultados para diferentes modelos, buscando o que melhor descreve a cinética de transformação das fases. Pretende-se gerar gráficos que possibilitem avaliar como ocorre a evolução da fração volumétrica de ferrita e de austenita durante os ciclos térmicos acima expostos, bem como o aparecimento de fases frágeis e indesejáveis como a sigma e os nitretos de cromo, além de verificar como se comportam os perfis de composição durante a cinética de transformações de fases. A validação experimental das frações das fases obtidas será feita por meio de tratamentos térmicos em laboratório, metalografia, ferritoscopia, difração de raios-X e estereologia quantitativa, a fim de que seja possível selecionar o modelo computacional que melhor descreva o comportamento real do aço a estudar.

Palavras-chave: aço inoxidável superdúplex, forjamento, transformação de fases, modelamento computacional, DICTRA.

ABSTRACT

The present project aims to perform computational simulation of the phase transformation's kinetics during forging thermal cycles of a superduplex stainless steel, for instance, during the heating of the material at different rates from room temperature, in the initial microstructural condition of 50 % of ferrite and 50% of austenite, up to 1250 ° C, typical forging temperature, at different holding times at this temperature, and in the cooling sequence at different rates, with the presence or not of a solubilization step, using software DICTRA. It is intended to evaluate the evolution of the volumetric fractions of the phases in the simulation, for later experimental validation in the laboratory of part of the simulations results, performing the thermal cycles and characterizing the formed microstructures. The input data for the simulations are chemical composition and phase size, temperature and rate of heating and cooling, thermodynamic database TCFE8 and atomic mobility database MOBF3, obtaining results for different models, searching for the one that best describes the phases transformation's kinetics. It will be evaluated the evolution of the ferrite and austenite volumetric fractions occurs during the thermal cycles discussed above, as well as the appearance of fragile and undesirable phases such as sigma and chromium nitrides, and the compositions profiles behavior during the phase transformations kinetics. Experimental microstructures will be obtained by means of thermal treatment in laboratory, and characterized by metallography, ferritoscopy, X-ray diffraction and quantitative stereology, in order determine the computational model that best describes the real behavior of the studied steel.

Keywords: superduplex stainless steel, forging, phase transformation, computational modeling, DICTRA.

1. INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA, COM SÍNTESE DA BIBLIOGRAFIA FUNDAMENTAL

Aços inoxidáveis superdúplex (AISD) são ligas baseadas no sistema ternário de ferro (Fe), cromo (Cr) e níquel (Ni), com adições de molibdênio (Mo) e nitrogênio (N) produzidas para nobres aplicações, que incluem setores petroquímicos, aeronáuticos e de óleo e gás, visto que são altamente resistentes à corrosão, além de tenazes e mecanicamente resistentes.

Possuem microestrutura típica de ferrita e austenita composta de 50% de cada fase, ambas inoxidáveis, obtidas por meio de tratamento térmico de solubilização entre 1000°C e 1300°C, interrompido em resfriamento em água (SOLOMON; DEVINE, 1982; BAIN; GRIFFITHS, 1997; RAYNOR; RIVLIN, 1988). Além disso, são classificados como superdúplex por possuírem número de resistência equivalente a pite (PREN - *pitting resistance equivalence number*) superior a 40, a partir da combinação entre cromo, molibdênio e nitrogênio por meio da relação $PREN = \%Cr + 3,3\%Mo + 1,6\%N$, calculada empiricamente (NILSSON, 1992).

Por se tratar de um aço termodinamicamente metaestável, deve-se estar atento em relação ao tempo e temperatura em que está sujeito, já que tenderá a buscar o equilíbrio quando receber qualquer insumo de energia (calor) podendo resultar em precipitações de fases secundárias indesejadas como a sigma, crescimento de grãos a ponto de deteriorar as propriedades mecânicas, além de perder a condição dúplex (NILSSON, 1992; PORTER; EASTERLING, 1992, LEANDRO, 2016).

Logo, simulações no software DICTRA poderiam ser capazes de descrever todas as transformações de fase que ocorrem de acordo com a condição térmica enfrentada durante ciclos térmicos usuais de fabricação, como os de forjamento, como por exemplo, desde o aquecimento até 1250°C para conformar plasticamente, partindo de um material a temperatura ambiente, como também o resfriamento controlado a um patamar de solubilização ou resfriamento total até temperatura ambiente.

Pode se utilizar o DICTRA por ser um software que simula transformações de ligas multicomponentes controladas por difusão, o qual se aproxima de condições reais através de modelos fundamentais, dados termodinâmicos e cinéticos. É capaz de

equacionar o fenômeno da difusão por meio da primeira Lei de Fick, ou seja, de fluxo difusivo em estado estacionário, sem variações ao longo do tempo, ou por meio da Segunda Lei de Fick, de fluxo difusivo não estacionário, variando tanto com a distância quanto com o tempo (ANDERSSON et al, 2001).

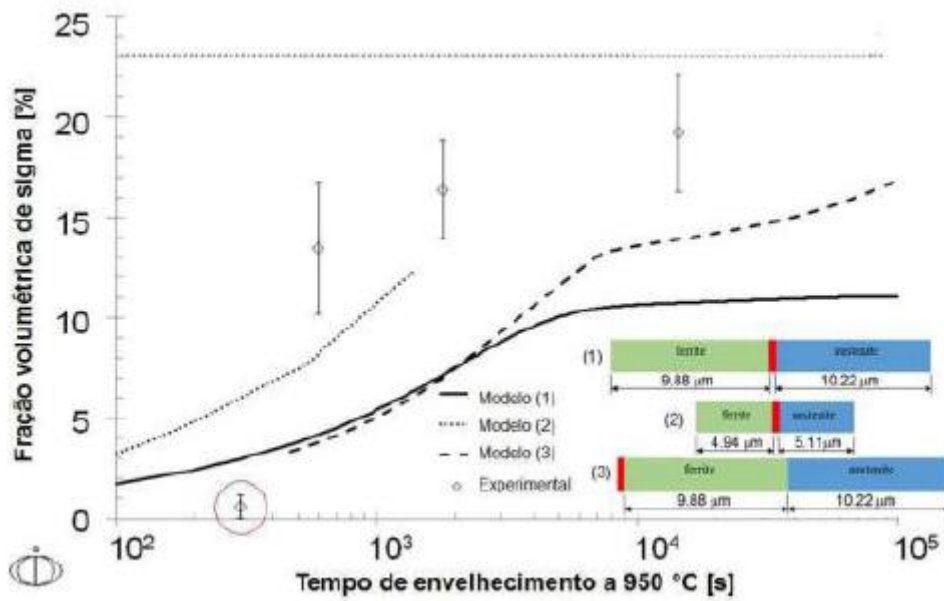
Alimentando-se o software com dados como a geometria do modelo, as fases que se deseja estudar, a dimensão e forma de cada uma delas, o tempo e temperatura de tratamento térmico e bases de dados necessárias, o DICTRA realiza o cálculo do equilíbrio local do sistema para todo intervalo de tempo, assumindo dados de equilíbrio termodinâmico, fornecidos pelo Thermo-Calc, na interface entre as fases (BORGENTAM et al., 2000). Assim, é possível obter importantes propriedades do aço em estudo como o perfil de determinado elemento químico ao longo de uma dimensão do modelo e tempo de tratamento térmico, a fração de fases presentes a determinado tempo e temperatura, a posição da interface entre as fases e o seu equilíbrio, entre outros.

Semelhante ao que será realizado neste projeto, trabalhos recentes do grupo de pesquisa do proponente, simularam como ocorrem as transformações de fase de AISD, tanto na solubilização quanto a temperaturas de formação da fase sigma, um composto intermetálico e frágil, formado entre 650 °C e 1.000 °C (HSIEH; WU, 2012).

Morais e Magnabosco (2017) realizaram o estudo da cinética de formação de fase sigma a 950°C no aço UNS S32750 para diferentes modelos que variam tamanho das fases e interfaces entre elas, utilizando o software DICTRA e a base de dados MOB2, em comparação com a validação experimental, vide Figura 1. Nota-se que os modelos não descrevem corretamente a evolução da fração volumétrica de sigma em função do tempo.

Já em 2017, a candidata à bolsa de mestrado solicitada por este projeto simulou em trabalhos de IC e TCC a cinética de formação de fase austenítica a 1250°C no aço UNS S32750 para diferentes modelos que variam composição química e base de dados, os quais foram capazes de descrever a evolução da fase em função do tempo, vide Figura 2.

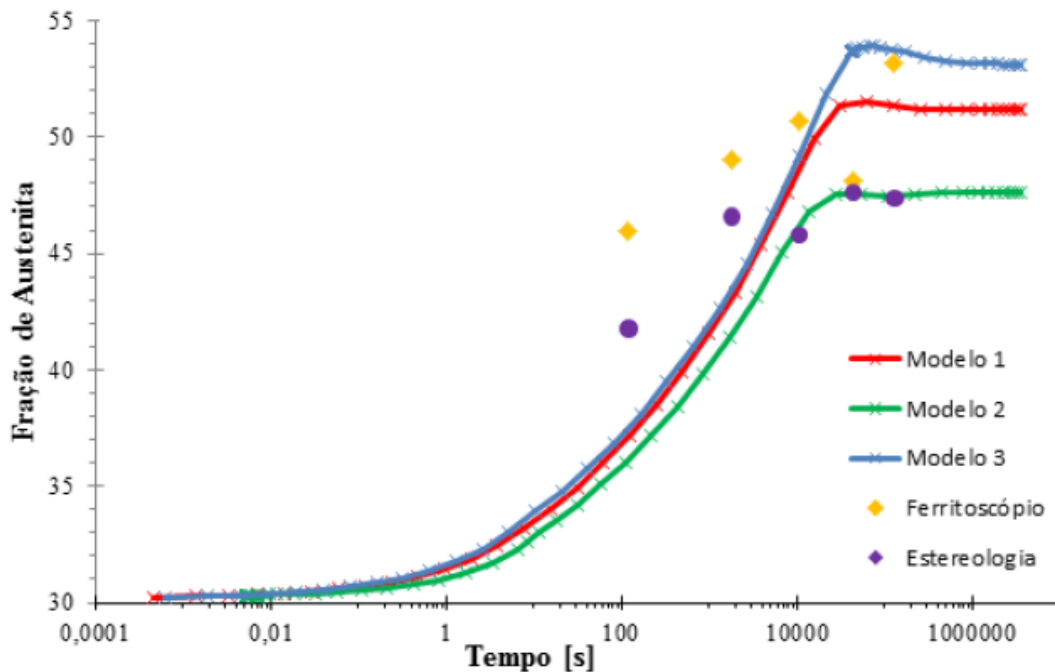
Figura 1 – Fração volumétrica de sigma após envelhecimento a 950°C



Fonte: Morais, adaptado de Magnabosco, 2017, p. 38

Legenda: (1) Tamanho da ferrita/austenita: 9,88 μm/10,22 μm e sigma na interface; (2) 4,94 μm /5,11 μm e sigma na interface; (3) 9,88 μm /10,22 μm e sigma à esquerda da ferrita

Figura 2 – Fração volumétrica de austenita após envelhecimento a 1250°C



Fonte: Fiorante, 2017, p. 63

Legenda: (1) 25,17Cr-6,88Ni-3,61Mo-0,25N-Fe e TCFE8/MOBFE3; (1) 25,17Cr-6,88Ni-3,61Mo-0,25N-0,25N-0,01C-0,69W-Fe e TCFE8/MOBFE; (3) 25,17Cr-6,88Ni-3,61Mo-0,25N-0,25N-0,01C-0,69W-Fe e SSOL4/MOB2

A candidata notou que os modelos de simulação propostos apresentaram diferenças sutis entre si, sendo conveniente utilizar o mais simples (modelo 1 da Figura 2), visto que o mesmo tem menor tempo de processamento e boa aderência aos resultados experimentais.

Sabendo-se que há poucos trabalhos que descrevem por simulação computacional as transformações de fase que ocorrem em ciclos térmicos como os de forjamento, com diferentes taxas de aquecimento e resfriamento até os patamares de conformação e/ou solubilização dos AISD, e sendo um tema de grande importância tecnológica, o trabalho aqui proposto permitirá desenvolver uma metodologia científica capaz de descrevê-las, além de propor soluções para o impasse de formação de fases frágeis.

2. OBJETIVOS

O presente projeto tem por objetivo avaliar a cinética de transformação de fases e a evolução da ferrita, austenita, nitretos de cromo e sigma durante o aquecimento do material a diferentes taxas a partir da temperatura ambiente, na condição microestrutural inicial de 50% de ferrita e 50% de austenita, até 1250°C, temperatura típica de forjamento, em diferentes tempos de patamar nesta temperatura, e na sequência no resfriamento em diferentes taxas, com a presença ou não de patamar de solubilização, utilizando-se o software DICTRA. Pretende-se avaliar na simulação a evolução das frações volumétricas das fases, para posterior validação experimental em laboratório de parte dos resultados destas simulações, realizando os ciclos térmicos e caracterizando as microestruturas formadas.

3. MATERIAL E METODOLOGIA

O aço inoxidável superdúplex em estudo, UNS S32750, foi fornecido pela Villares Metals como uma barra laminada a quente, solubilizada a 1120°C por 1h30min e resfriada em água, de 82 mm de diâmetro e 3 m de comprimento, cuja composição química é apresentada na Tabela 1.

O projeto será dividido nas seguintes etapas: revisão da literatura, simulação computacional, caracterização microestrutural, obtenção de créditos e elaboração da dissertação, conforme pode ser visto no cronograma da Tabela 2.

Tabela 1 – Composição química (% em massa) do aço UNS S32750

Cr	Ni	Mo	N	C	Si	Cu	W	Fe
25,17	6,88	3,61	0,25	0,01	0,40	0,58	0,69	Bal.

Fonte: Fiorante, 2017

Legenda: Composição química de análise realizada pela Villares Metals

A. Revisão da literatura: Deverá conter uma revisão de fenômenos que ocorrem nos AISD quando estão sujeitos a temperaturas que transformam as fases durante ciclos térmicos como os de forjamento, bem como a capacidade e importância da simulação computacional em descrevê-los, com a finalidade de se aprofundar nas técnicas e mostrar a relevância tecnológica do tema.

B. Simulação computacional: Serão utilizados os softwares ThermoCalc e DICTRA como meios computacionais para obter aproximações de como ocorrem as transformações de fase nos AISD, com a finalidade de determinar parâmetros como temperatura de tratamento térmico e taxas de aquecimento e resfriamento para evitar-se a formação de fase sigma ou nitretos de cromo, e descrever como se dá a cinética de transformação de fases ferrítica e austenítica, e como as mesmas evoluem com o processo. Os dados de entrada serão composição química do aço UNS S32750 e tamanho das fases, temperatura e taxa de aquecimento e resfriamento, base de dados termodinâmica TCFE8 e base de dados de mobilidade atômica MOBFE3.

C. Caracterização microestrutural: Será feito o corte de amostras do aço UNS S32750, já na condição dúplex, as quais sofrerão tratamentos térmicos que reproduzam alguns dos ciclos térmicos simulados no DICTRA na etapa anteriormente descrita. Em seguida, as amostras serão embutidas em baquelite, separando-se uma amostra de cada etapa descrita, preparadas para análise metalográfica por meio de lixamento, polimento e ataque químico com o reagente Beraha modificado, para caracterização por micrografia e estereologia quantitativa em microscopia óptica (MO). Outras amostras, também uma de cada etapa, serão preparadas e atacadas com ácido oxálico, para revelar

os contornos de grãos e calcular o tamanho médio pelo método dos interceptos lineares. Amostras apenas polidas serão utilizadas para determinação da fração de ferrita ferritoscopia, e para determinação das fases presentes por difração de raios-X.

D. Obtenção de créditos: A candidata deverá obter créditos em disciplinas do programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, na área de concentração de materiais e processos, do Centro Universitário FEI, as quais darão o embasamento teórico e metodologia científica necessária para o desenvolvimento do projeto proposto e elaboração da dissertação de mestrado.

E. Elaboração de dissertação: Sob orientação do proponente, a candidata deverá elaborar a dissertação de mestrado a partir da revisão crítica da literatura e objetivos propostos, além de análise e revisão dos resultados, produzindo textos para a qualificação, preferencialmente em #, e defesa da dissertação final prevista para &, conforme indicado no cronograma da Tabela 2.

Duração (meses)												
Atividade	1-2	3-4	5-6	7-8	9-10	11-12	13-14	15-16	17-18	19-20	21-22	23-24
A	■						■					
B		■										
C	■					■			■			
D	■											
E			■					#	■			&

4. FOMENTO SOLICITADO

Solicita-se bolsa de mestrado do tipo CAPES-taxa para a aluna recém-formada em Engenharia de Materiais no Centro Universitário FEI, Mariana Tortella Merli Fiorante, orientada pelo proponente deste projeto, Prof. Dr. Rodrigo Magnabosco, pelo período de 24 meses.

REFERÊNCIAS

ANDERSSON, J-O.; HELANDER, T.; HÖGLUND, L.; SHI, P.; SUNDMAN, B. THERMO-CALC & DICTRA, Computational Tools For Materials Science, 2001.

BAIN, E. C; GRIFFITHS, W. E. **An Introduction to the Iron-Chromium Nickel Alloys Trans.** AIME, n.75, p.166-213, 1927.

BORGENSTAM et al. **DICTRA, a tool for simulation of diffusional transformations in alloys**, 2000. Journal of Phase Equilibria, v. 21, n°3, p. 269 – 280.

HSIEH, C.; WU, W. **Overview of intermetallic sigma (σ) phase precipitation in stainless steels.** ISRN Metallurgy, v. 2012, p. 1- 16.

FIORANTE, M. T. **Validação experimental dos modelamentos computacionais de ciclos térmicos de solubilização de um aço inoxidável superdúplex**, 2018. Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo.

LEANDRO, R. M. **Cinética de crescimento de grão na solubilização de um aço inoxidável dúplex**, 2016. Dissertação, Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2016. Disponível em:
<http://fei.edu.br/~rodrmagm/mestrado/2016/VF_Rafael_Malagutti_Leandro.pdf>. 02 setembro 2017

MORAIS, L. C, MAGNABOSCO, R. **Investigações experimentais e simulação DICTRA ® da formação da fase sigma em um aço inoxidável duplex**, 2017. Centro Universitário FEI, São Bernardo do Campo, 2017.

NILSSON, J.O. **Super Dúplex Stainless Steel.** Materials Science and Technology, 1992. p. 685-700.

PORTER, D.A; EASTERLING, K.E. **Phase transformations in metals and alloys**, 1992. 2 Ed. New York: Taylor & Francis, p. 514.

RAYNOR, G. V.; RIVLIN, V. G. **Phase equilibria in iron ternary alloys**, 1985. London, p. 316-332.

SOLOMON, H. D.; DEVINE, T. M. Jr. **Dúplex Stainless Steel: A tale of two phases.** In: DÚPLEX STAINLESS STEELS, 1982, Ohio, Conference Proceedings. ASM Metals Park. p. 693-756.