



Universidade Federal de Ouro Preto - UFOP
Escola de Minas
Departamento de Engenharia Metalúrgica e de Materiais
Campus Morro do Cruzeiro
Ouro Preto – Minas Gerais – Brasil



MONOGRAFIA DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

**Avaliação da Eficácia de um Modelo Empírico para Previsão de
Temperaturas Críticas de Transformações de Fases em Aços
Submetidos a Resfriamento Contínuo**

Thaynara Melo Moussa

Ouro Preto, Setembro de 2023.

Thaynara Melo Moussa

**Avaliação da Eficácia de um Modelo Empírico para Previsão de Temperaturas
Críticas de Transformações de Fases em Aços Submetidos a Resfriamento
Contínuo**

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Metalúrgica da Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto como parte dos requisitos para a obtenção do Grau de Engenharia Metalúrgica.

Orientador: Prof. Dr. Geraldo Lúcio de Faria.

Setembro de 2023

SISBIN - SISTEMA DE BIBLIOTECAS E INFORMAÇÃO

M933a Moussa, Thaynara Melo.

Avaliação da eficácia de um modelo empírico para previsão de temperaturas críticas de transformações de fases em aços submetidos a resfriamento contínuo. [manuscrito] / Thaynara Melo Moussa. - 2023. 28 f.: il.: color., gráf., tab..

Orientador: Prof. Dr. Geraldo Lúcio de Faria.
Monografia (Bacharelado). Universidade Federal de Ouro Preto.
Escola de Minas. Graduação em Engenharia Metalúrgica .

1. Aço - Tratamento térmico - Diagramas TRC. 2. Cinética química - Transformação de Fases. 3. Aço - Tratamento térmico - Resfriamento Contínuo. I. Faria, Geraldo Lúcio de. II. Universidade Federal de Ouro Preto. III. Título.

CDU 669

Bibliotecário(a) Responsável: Maristela Sanches Lima Mesquita - CRB-1716



FOLHA DE APROVAÇÃO

Thaynara Melo Moussa

Avaliação da eficácia de um modelo empírico para previsão de temperaturas críticas de transformações de fases em aços submetidos a resfriamento contínuo

Monografia apresentada ao Curso de Engenharia Metalúrgica da Universidade Federal de Ouro Preto como requisito parcial para obtenção do título de Engenheira Metalúrgica

Aprovada em 01 de setembro de 2023

Membros da banca

DSc. Geraldo Lúcio de Faria - Orientador - Universidade Federal de Ouro Preto
DSc. Rodrigo Rangel Porcaro - Membro - Universidade Federal de Ouro Preto
DSc. Charles Henrique Xavier Morais Magalhães - Membro - Rede Temática em Engenharia de Materiais

Geraldo Lúcio de Faria, orientador do trabalho, aprovou a versão final e autorizou seu depósito na Biblioteca Digital de Trabalhos de Conclusão de Curso da UFOP em 02/10/2023



Documento assinado eletronicamente por **Geraldo Lucio de Faria, PROFESSOR DE MAGISTERIO SUPERIOR**, em 02/10/2023, às 14:23, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site http://sei.ufop.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **0581652** e o código CRC **A28E2482**.

RESUMO

Durante o resfriamento contínuo dos aços, a austenita prévia, a depender da taxa de resfriamento empregada, se decompõe em diferentes constituintes, definindo a microestrutura final do produto. O ajuste fino dessa microestrutura é relevante para permitir que os aços manufacturados possuam uma combinação favorável de propriedades mecânicas, possibilitando um bom desempenho nas aplicações desejadas. Nesse sentido, se faz necessário prever a cinética de transformações de fases durante o resfriamento contínuo, pois, uma vez que as temperaturas críticas de transformação possam ser previamente calculadas, pode-se realizar um planejamento preciso de tratamentos térmicos. Nesse contexto, este trabalho avaliou a eficácia de um modelo matemático empírico proposto por Cezário (2018) como ferramenta de previsibilidade de cinética de transformação de fases sob resfriamento contínuo aplicada a diferentes tipos de aços. O modelo estudado se mostrou eficiente para prever as temperaturas críticas de transformação da austenita em constituintes difusionais, além de possibilitar, à partir de regressões lineares múltiplas, a construção de equações para Ar_3 e Ar_1 que permitiram calcular com boa eficácia os diagramas TRC dos aços em função da utilização da composição química e da taxa de resfriamento como dados de entrada.

Palavras-chave: Diagramas TRC, Modelo Empírico, Previsibilidade, Cinética de Transformação de Fases, Resfriamento Contínuo.

ABSTRACT

During the continuous cooling of steels, the prior austenite, depending on the employed cooling rate, decomposes into different constituents, defining the final product microstructure. The fine tuning of this microstructure is relevant to allow the manufactured steels to have a satisfactory combination of mechanical properties, achieving their good performance for the desired applications. In this sense, it is necessary to predict the kinetics of phase transformation during continuous cooling, because as long as the critical transformation temperatures can be previously calculated, the precise planning of heat treatments can be carried out. Therefore, this work evaluated the effectiveness of an empirical mathematical model proposed by Cezário (2018) as a predictability tool for phase transformation kinetics under continuous cooling applied to different steel types. The model proved to be efficient in predicting critical temperatures for the transformation of austenite into diffusional constituents, in addition to enabling, based on multiple linear regressions, to find equations for Ar_3 and Ar_1 that allowed the calculation of CCT steels' diagrams based on their chemical composition and cooling rate as input data.

Key-words: CCT diagrams, Empirical Model, Predictability, Phase Transformation Kinetics, Continuous Cooling.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Diagramas TRC experimentais dos aços: a) aço A; b) aço B; c) aço C; d) aço D.....	13
Figura 2.2. Diagramas TRC experimentais dos aços: e) aço E; f) aço F; g) aço G; h) aço H. (FQP → ferrita quase-poligonal; FG → ferrita granular; FB → ferrita bainítica; FP → ferrita poligonal; B → bainita; P → perlita; P' → perlita degenerada).....	13
Figura 2.3. Diagramas TRC experimentais dos aços: i) aço I; j) aço J.	14
Figura 3.1. Modelo empírico ajustado aos dados experimentais para os aços: a) aço A; b) aço B; c) aço C; d) aço D.	17
Figura 3.2. Modelo empírico ajustado aos dados experimentais para os aços: e) aço E; f) aço F; g) aço G; h) aço H.....	18
Figura 3.3. Modelo empírico ajustado aos dados experimentais para os aços: i) aço I; j) aço J.	18
Figura 3.4. Diagrama TRC medido (real) e diagrama TRC calculado pelo modelo empírico como função da taxa de resfriamento e composição química; a) aço A; b) aço B; c) aço C; d) aço D.	22
Figura 3.5. Diagrama TRC medido (real) e diagrama TRC calculado pelo modelo empírico como função da taxa de resfriamento e composição química; e) aço E; f) aço F; g) aço G; h) aço H.	22
Figura 3.6. Diagrama TRC medido (real) e diagrama TRC calculado pelo modelo empírico como função da taxa de resfriamento e composição química; i) aço I; j) aço J.....	23

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Composições químicas dos aços estudados neste trabalho (% em massa).....	10
Tabela 3.1. Parâmetros γ_0 , A e B do modelo empírico proposto por Cezário escritos como função da composição química, para a previsão da temperatura de início da decomposição da austenita em constituintes difusionais (A_{r3}).....	20
Tabela 3.2. Parâmetros γ_0 , A e B do modelo empírico proposto por Cezário escritos como função da composição química, para a previsão da temperatura de final de decomposição da austenita em constituintes difusionais (A_{r1}).....	20

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	8
2 MATERIAIS E MÉTODOS	10
2.1 Materiais	10
2.2 Ajuste do Modelo Empírico aos Dados de Temperatura Crítica x Taxa de Resfriamento.....	14
2.3 Determinação de Equações para A_{r3} e A_{r1} como Função da Composição Química e da Taxa de Resfriamento	14
2.4 Predição dos Diagramas TRC dos Aços Estudados a partir das Temperaturas Críticas Calculadas pelo Modelo Proposto.....	16
3 RESULTADOS E DISCUSSÃO	16
3.1 Ajuste do Modelo Empírico aos Dados de Temperatura Crítica como Função da Taxa de Resfriamento.....	16
3.2 Interpretação dos valores y_0 , A e B Obtidos por meio do Ajuste do Modelo Empírico aos Dados Experimentais.....	19
3.3 Determinação de Equações para A_{r3} e A_{r1} como Função da Composição Química e da Taxa de Resfriamento	20
3.4 Comparação entre os diagramas TRC Experimentais e Aqueles Calculados pelo Modelo Empírico Avaliado	21
4. CONCLUSÕES	24
5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	26

1 INTRODUÇÃO

A cinética de transformação de fases em processos isotérmicos é descrita com sucesso pelo modelo clássico de Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov ou simplesmente JMAK (JOHNSON e MEHL, 1939; AVRAMI, 1939; KOLMOGOROV, 1937). Entretanto, a maior parte das plantas industriais que processa aços, em suas rotas de fabricação, emprega sistemas de resfriamento contínuo após uma etapa prévia de austenitização. Com o objetivo de se prever a cinética de transformação de fases em aços resfriados continuamente, usualmente utiliza-se uma versão adaptada do modelo de JMAK, que nem sempre apresenta sucesso (CEZÁRIO, PORCARO e FARIA, 2019; KOHOUT, 2008; RODRIGUES e FARIA, 2021; CABALLERO, CAPDEVILA e ANDRÉS, 2001).

Segundo Ghosh, Singh e Mula (2016), durante o resfriamento contínuo dos aços, a austenita prévia se decompõe em diferentes constituintes, a depender da taxa de resfriamento utilizada, definindo então a microestrutura final do produto. Várias propriedades dos aços são intimamente dependentes da microestrutura, fazendo com que condições ideais de tratamentos térmicos devam ser bem planejadas com o objetivo de se obter uma microestrutura adequada a determinada aplicação. Isso passa pela determinação das temperaturas de início (A_{r3}) e fim (A_{r1}) de decomposição da austenita sob resfriamento contínuo fora do equilíbrio, pois, uma vez que essas temperaturas possam ser previamente calculadas, o preciso planejamento de tratamentos térmicos poderá ser feito (RODRIGUES e FARIA, 2021; CABALLERO, CAPDEVILA e ANDRÉS, 2001; GHOSH, SINGH e MULA, 2016; GOMEZ, MEDINA e CARUANA, 2003; CARDOSO e FARIA, 2019).

Há várias equações na literatura criadas com o objetivo de se determinar as temperaturas críticas de transformação da austenita, tanto no aquecimento quanto no resfriamento (CEZÁRIO, PORCARO e FARIA, 2019; RODRIGUES e FARIA, 2021; CABALLERO, CAPDEVILA e ANDRÉS, 2001; TRZASKA, 2016; SCHACHT, PRAHL e BLECK, 2016; PICKERING, 1989; CHOQUET, LEBON e PEDRIX, 1985; BLÁS *et al.*, 1989, ANDREWS, 1965). Porém, essas equações, em geral, são válidas para tipos específicos de aços (faixas de composição química limitadas) e sob condições muito restritas de taxas de resfriamento/aquecimento. Há relatos de que essas equações apresentam desvios relativamente elevados ao se comparar os valores previstos por elas e aqueles medidos experimentalmente.

Além disso, a maior parte dos modelos físicos criados com o objetivo de prever a cinética de transformação de fases em aços submetidos a resfriamento contínuo é matematicamente muito complexa, assume muitas simplificações físicas e requer elevado poder de processamento computacional (RODRIGUES e FARIA, 2021; CABALLERO, CAPDEVILA e ANDRÉS, 2001; BOK et al., 2015; POHJONEN, SOMANI e PORTER, 2018). Nesse sentido, um modelo relativamente simples foi proposto por Cezário (2018) com o objetivo de se determinar as temperaturas críticas de decomposição da austenita em constituintes difusionais (Equação 1), onde os termos y_0 , A e B são parâmetros de ajuste, $taxa$ é a taxa de resfriamento e T é a temperatura crítica, podendo assumir os valores de Ar_3 ou Ar_1 .

$$T = y_0 + A * \exp(B * taxa) \quad (1)$$

O modelo proposto por Cezário (2018) se mostrou eficiente quando aplicado a alguns aços IF e aços eutetóides de aplicação ferroviária (CEZÁRIO, PORCARO e FARIA, 2019; RODRIGUES e FARIA, 2021; CEZARIO, 2018). Porém, a equação proposta por Cezário (2018) foi testada para poucos aços, e uma avaliação mais ampla é importante e se faz necessária com o objetivo de avaliar sua eficácia quando aplicada a outras famílias de aços. Nesse contexto, este estudo teve como objetivo avaliar a eficiência do modelo matemático empírico proposto por Cezário (2018), na forma da Equação 1, como ferramenta de previsibilidade de temperaturas críticas de transformação de fases sob resfriamento contínuo aplicada a diferentes tipos de aços.

2 MATERIAIS E MÉTODOS

2.1 Materiais

Nesta pesquisa, dez aços com diferentes microestruturas iniciais e composições químicas foram selecionados a partir de diferentes trabalhos de pesquisa previamente realizados pelo Grupo de Pesquisas do Laboratório de Tratamentos Térmicos e Microscopia Óptica (LTM) da Escola de Minas da Universidade Federal de Ouro Preto. A Tabela 2.1 mostra as composições químicas destes aços. Verifica-se por meio da Tabela 1 a notória diferença entre os aços selecionados para este estudo, com destaque especial para os teores de carbono, manganês, cromo e molibdênio.

Tabela 2.1 - Composições químicas dos aços estudados neste trabalho (% em massa).

Elemento	C	Si	S	Mn	P	Cr	Mo	Ni	Al	V	Nb	Ti	B
Aço A	0,792	0,304	0,0043	0,883	0,017	0,209	0,016	0,02270	0,0053	0,0016	0,0022	0,0005	-
Aço B	0,043	0,19	0,001	0,26	0,009	0,49	-	0,15	-	-	0,089	0,012	-
Aço C	0,08	0,256	0,006	1,25	0,01	0,01	-	0,01	-	0,003	0,041	0,001	-
Aço D	0,47	0,23	0,015	0,70	0,020	0,028	-	-	-	-	-	-	-
Aço E	0,44	0,25	0,006	1,47	0,025	0,005	-	-	-	-	-	-	-
Aço F	0,14	0,28	0,009	0,85	0,028	0,02	-	0,22	0,035	0,003	0,001	-	0,0001
Aço G	0,16	0,21	0,004	1,27	0,016	0,010	-	0,010	0,042	0,004	0,030	-	0,0001
Aço H	0,09	0,280	0,002	1,461	0,006	0,127	0,084	0,161	0,029	0,041	0,0259	-	0,0005
Aço I	0,25	0,21	0,002	1,02	0,011	0,32	0,032	0,05	0,028	0,0046	-	0,03	0,0014
Aço J	0,004	0,0289	0,0107	0,104	0,0135	-	0,0132	-	0,0343	-	0,003	0,0577	-

Os aços estudados neste trabalho podem ser classificados da forma que se segue:

- Aço A: aço eutetóide de aplicação ferroviária. Esse aço se caracteriza por ser um aço alto carbono e baixa liga;
- Aço B: aço baixo carbono, baixo Mn, microligado ao Nb. Ele faz parte de uma classe de aços relativamente recentes no mercado com destinação ao segmento industrial de óleo e gás, com composição química promissora para a obtenção de produtos termomecanicamente laminados com elevada tenacidade e baixa susceptibilidade à corrosão HIC (*Hydrogen Induced Cracking* ou trincamento induzido por hidrogênio);
- Aço C: aço baixo carbono, alto Mn, microligado ao Nb, também destinado ao mercado

de óleo e gás. Esse aço, quando laminado de forma controlada, tem potencial para ser classificado como um produto API X65, podendo ser utilizado como matéria-prima para a fabricação de tubos de aço com costura;

- Aço D: aço médio carbono comum (SAE 1045) altamente usado na indústria automobilística, com soldabilidade moderada, baixa temperabilidade e boas propriedades mecânicas na condição normalizada ou laminada;
- Aço E: aço médio carbono alto manganês (SAE 1345) com temperabilidade intermediária. É comumente usado onde uma boa resistência mecânica é necessária, mas uma tenacidade baixa a média é suficiente. É usado na fabricação de engrenagens, eixos, parafusos, entre outros;
- Aço F: aço patinável (COR400), usado em estruturas metálicas sem pintura e expostas às intempéries, e apresentam propriedades de resistência à corrosão superiores aliadas a baixo custo quando comparados aos aços estruturais convencionais;
- Aço G: aço estrutural para construção civil (CIVIL350). É um aço com garantia de composição química e propriedades mecânicas, empregado em pontes, galpões, torres de transmissão, caçambas, estruturas metálicas utilizadas em obras civis e componentes de equipamentos em geral da indústria de base;
- Aço H: aço estrutural de elevada temperabilidade destinado à indústria de óleo e gás. Ele se caracteriza por ser um aço baixo carbono com significativa adição de elementos como B, Cr e Ni. Usualmente, é empregado como matéria-prima para a fabricação de tubos de aço sem costura utilizados como tubos de condução de hidrocarbonetos (*pipelines*);
- Aço I: aço estrutural também destinado à indústria de óleo e gás. Este aço se caracteriza por ser médio carbono com adição de Cr e Mo. Quando termicamente tratado por têmpera e revenimento, ele usualmente atende o grau API K55, sendo utilizado como matéria-prima para a fabricação de tubos de aço sem costura que são empregados como tubos de revestimento em poços para exploração de hidrocarbonetos (tubos *casing* OCTG);
- Aço J: aço *interstitial free* (IF) estabilizado ao Ti. É um aço baixíssimo carbono com excelente estampabilidade. Sua principal aplicação atual é na fabricação de alguns componentes automotivos.

Os diagramas experimentais de transformação sob resfriamento contínuo (diagramas TRC) desses aços foram obtidos pelo grupo LTM/UFOP por meio da utilização da clássica técnica de dilatométrica, que é bem descrita na literatura (RODRIGUES e FARIA, 2021; CARDOSO e FARIA, 2019). Esses diagramas, todos obtidos por meio de experimentos realizados em um dilatômetro de têmpera L78 R.I.T.A., da fabricante Linseis, podem ser observados nas Figuras de 1 a 3, com suas respectivas condições experimentais (temperatura de austenitização (T_γ) e as taxas de resfriamento que levaram à formação de constituintes difusionais).

Nas Figuras de 2.1 a 2.3, nota-se que, para todos os aços selecionados, as temperaturas críticas de início (A_{r3}) e final (A_{r1}) de decomposição de austenita em constituintes difusionais foram experimentalmente determinadas para as taxas de resfriamento avaliadas. Neste trabalho, considerando que a Equação 1, proposta por Cezário (2018), foi desenvolvida apenas para descrever transformações difusionais, as temperaturas de início (M_i) e final (M_f) de transformação martensítica não foram consideradas.

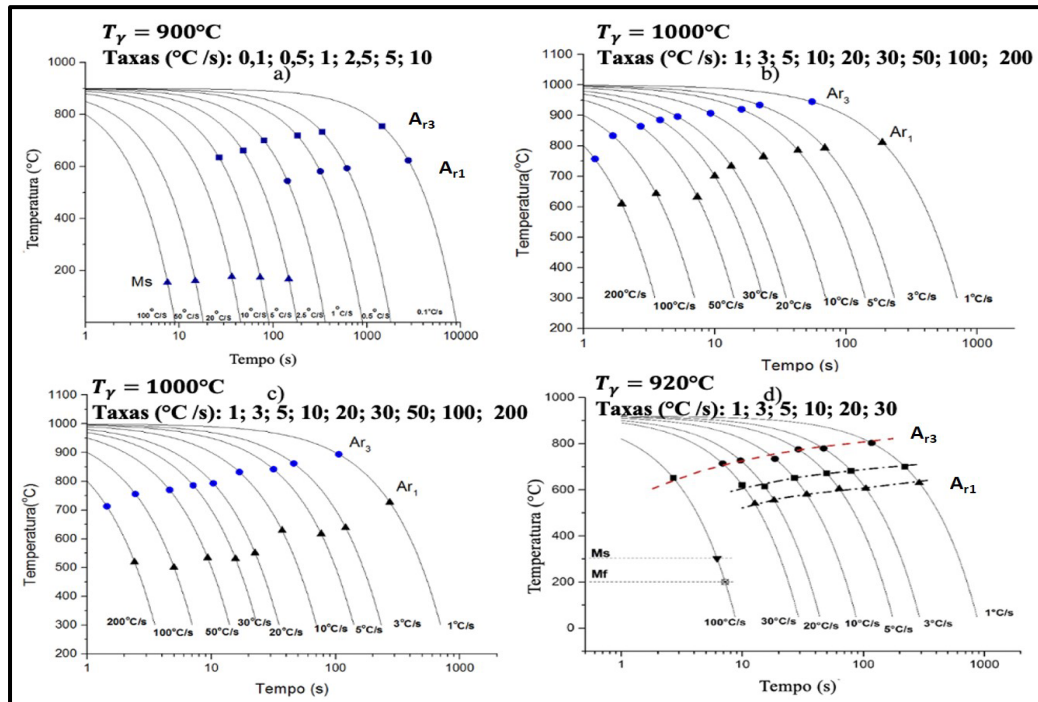


Figura 2.1. Diagramas TRC experimentais obtidos para os aços: a) A; b) B; c) C; d) D.

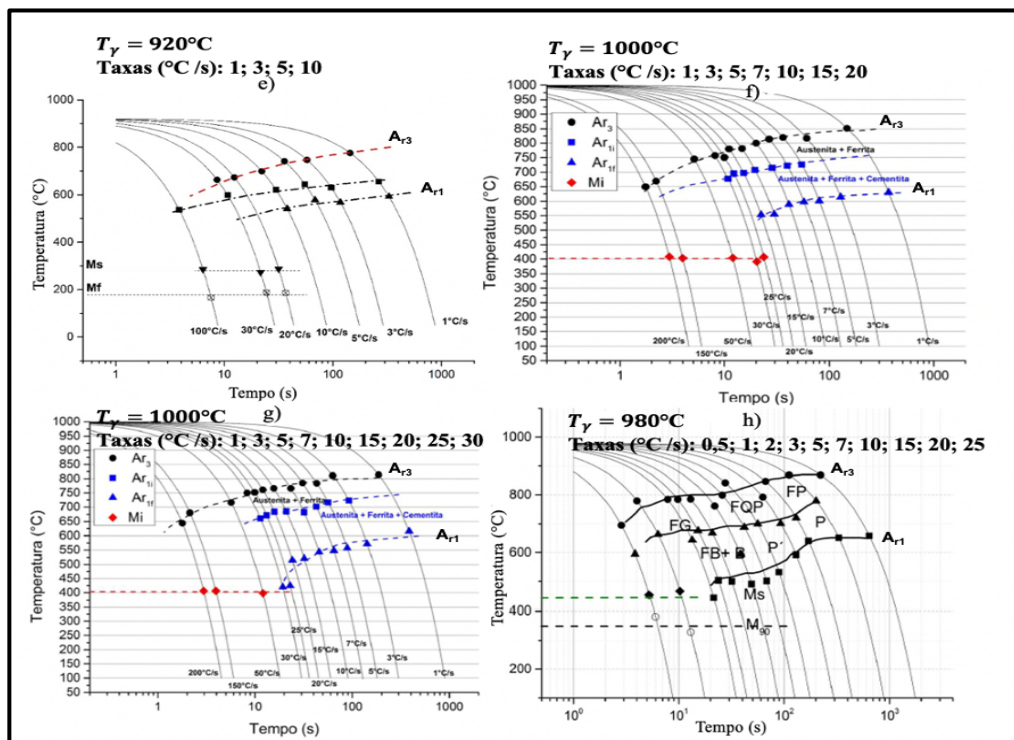


Figura 2.2. Diagramas TRC experimentais obtidos para os aços: e) E; f) F; g) G; h) H. (FQP → ferrita quase-poligonal; FG → ferrita granular; FB → ferrita bainítica; FP → ferrita poligonal; B → bainita; P → perlita; P' → perlita degenerada).

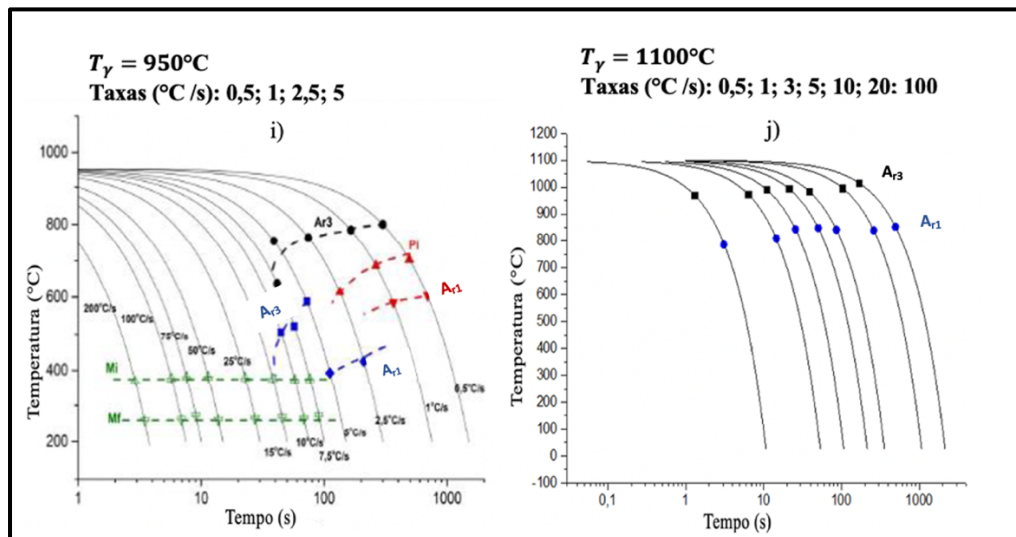


Figura 2.3. Diagramas TRC experimentais dos aços: i) I; j) J.

A partir das Figuras 2.1, 2.2 e 2.3, podem ser observadas as temperaturas de austenitização, T_γ , de cada um dos aços estudados. Além disso, as taxas de resfriamento escritas nas Figuras 2.1, 2.2 e 2.3 referem-se a taxas de resfriamento que levaram à formação de constituintes difusionais.

2.2 Ajuste do Modelo Empírico aos Dados de Temperatura Crítica x Taxa de Resfriamento

A partir dos dados de temperaturas críticas A_{r3} e A_{r1} experimentalmente obtidos (Figuras de 2.1 a 2.3), gráficos de temperaturas críticas em função da taxa de resfriamento foram plotados e, então, a equação do modelo empírico proposto por Cezário (2018) (Equação 1) foi ajustada aos dados por meio de procedimentos de regressão exponencial. Dessa forma, os valores das constantes de ajuste y_0 , A e B foram obtidos para cada um dos aços estudados.

2.3 Determinação de Equações para A_{r3} e A_{r1} como Função da Composição Química e da Taxa de Resfriamento

Buscando verificar um possível significado físico para as constantes de ajuste y_0 , A e B do modelo de Cezário (2018), os valores dessas, tanto para A_{r3} quanto para A_{r1} , para os dez aços estudados, foram usados com o objetivo de se criar regressões lineares múltiplas com o auxílio do software Excel. Essas regressões permitiram escrever os

parâmetros y_0 , A e B como uma função da composição química. Os elementos considerados foram: carbono, manganês, silício, cromo, níquel, molibdênio e boro. Essa escolha de elementos se deu pelo fato de que esses, quando em solução sólida, possuem significativa influência sobre a difusão atômica, influenciando, portanto, a cinética de decomposição da austenita (KRAUSS, 2015). Elementos como Ti, V, e Nb não foram considerados, pois nas temperaturas de austenitização utilizadas nos ensaios dilatométricos dos aços considerados, esses elementos estariam majoritariamente na forma de precipitados (carbonetos ou carbonitretos), exercendo pouca influência sobre a evolução cinética da transformação (KRAUSS, 2015).

As equações propostas neste trabalho para calcular os parâmetros y_0 , A e B, tanto para A_{r3} quanto para A_{r1} , foram obtidas por meio de regressões lineares múltiplas e foram escritas na forma das Equações 2, 3 e 4.

$$y_0 = x_0 + x_1 \cdot \%C + x_2 \cdot \%Mn + x_3 \cdot \%Si + x_4 \cdot \%Cr + x_5 \cdot \%Ni + x_6 \cdot \%Mo + x_7 \cdot \%B \quad (2)$$

$$A = x_8 + x_9 \cdot \%C + x_{10} \cdot \%Mn + x_{11} \cdot \%Si + x_{12} \cdot \%Cr + x_{13} \cdot \%Ni + x_{14} \cdot \%Mo + x_{15} \cdot \%B \quad (3)$$

$$B = x_{16} + x_{17} \cdot \%C + x_{18} \cdot \%Mn + x_{19} \cdot \%Si + x_{20} \cdot \%Cr + x_{21} \cdot \%Ni + x_{22} \cdot \%Mo + x_{23} \%B \quad (4)$$

2.4 Predição dos Diagramas TRC dos Aços Estudados a partir das Temperaturas Críticas Calculadas pelo Modelo Proposto

De posse das composições químicas dos aços avaliados, os valores de y_0 , A e B, tanto para A_{r3} quanto para A_{r1} , foram obtidos pelas Equações 2, 3 e 4. Assim, as temperaturas críticas A_{r3} e A_{r1} , para cada taxa de resfriamento, foram calculadas por meio da Equação 1. Nesse contexto, como o diagrama TRC consiste em um gráfico de temperatura de transformação *versus* tempo, faltaria apenas a determinação dos instantes de tempo correspondentes a cada uma das temperaturas críticas de início e final de decomposição da austenita. Para esse fim, a Equação 5 foi utilizada. Nela, t é o instante de tempo correspondente à temperatura crítica de início ou final de transformação, considerando o instante 0 como sendo o início do resfriamento; $T\gamma$ é a temperatura de austenitização; T é a temperatura crítica calculada pelo modelo (A_{r3} ou A_{r1}); “*taxa*” é a taxa de resfriamento empregada. Portanto, a partir da utilização apenas das composições químicas dos aços como dados de entrada, assim como por meio da utilização das Equações de 1 a 5, foi possível obter diagramas TRC calculados para cada um dos aços estudados. Os diagramas calculados foram comparados aos obtidos experimentalmente.

$$t = \frac{T - T\gamma}{\text{taxa}} \quad (5)$$

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Ajuste do Modelo Empírico aos Dados de Temperatura Crítica como Função da Taxa de Resfriamento

Para cada um dos aços estudados, os gráficos de temperatura crítica (A_{r3} ou A_{r1}) em função da taxa de resfriamento foram plotados com o auxílio do software Origin 9.0. A Equação 1 foi ajustada a esses pontos experimentais por meio de regressões exponenciais, sendo assim possível que os valores de y_0 , A e B fossem determinados tanto para A_{r3} quanto para A_{r1} . As Figuras 3.1 a 3.3 apresentam as regressões exponenciais feitas para os dez aços. Nelas, é possível observar, individualmente, as constantes calculadas, assim como os coeficientes de determinação R^2 .

Observa-se que, de modo geral, o modelo apresenta boa concordância com os dados

experimentais. Além disso, os desvios máximos entre os valores experimentais e os calculados pelo modelo foram da ordem de 20°C. Atualmente, sabe-se que equações empíricas propostas na literatura para A_{r3} , A_{r1} , A_{c3} e A_{c1} , com R^2 relativamente baixos, da ordem de até 0,7, são amplamente empregadas como boa referência para nortear processos industriais (TRZASKA, 2016; KOTSAR *et al.*, 1997; SCHACHT, PRAHL e BLECK, 2016; PICKERING, 1986; CHOQUET, LEBON e PERDRIX, 1985; BLÁS *et al.*, 1989, ANDREWS, 1965).

Neste contexto, considerando que os menores valores de R^2 obtidos neste trabalho foram de 0,59 para A_{r3} e 0,84 para A_{r1} para o aço J, um aço baixo-carbono, baixo-manganês, alto nióbio ainda pouco utilizado comercialmente, pode-se considerar que os resultados obtidos sinalizam que o modelo proposto por Cezário (2018) realmente parece promissor para se prever as temperaturas críticas A_{r3} e A_{r1} para diferentes tipos de aços. Além disso, em processos industriais, as variações intrínsecas dos equipamentos são certamente maiores do que os desvios apresentados nos ajustes obtidos. Considerando-se que sempre são empregados fatores de segurança, pode-se concluir que o modelo pode ser promissor para auxiliar na previsibilidade das temperaturas críticas e ser utilizado como uma referência para ajustes em rotas de processos industriais.

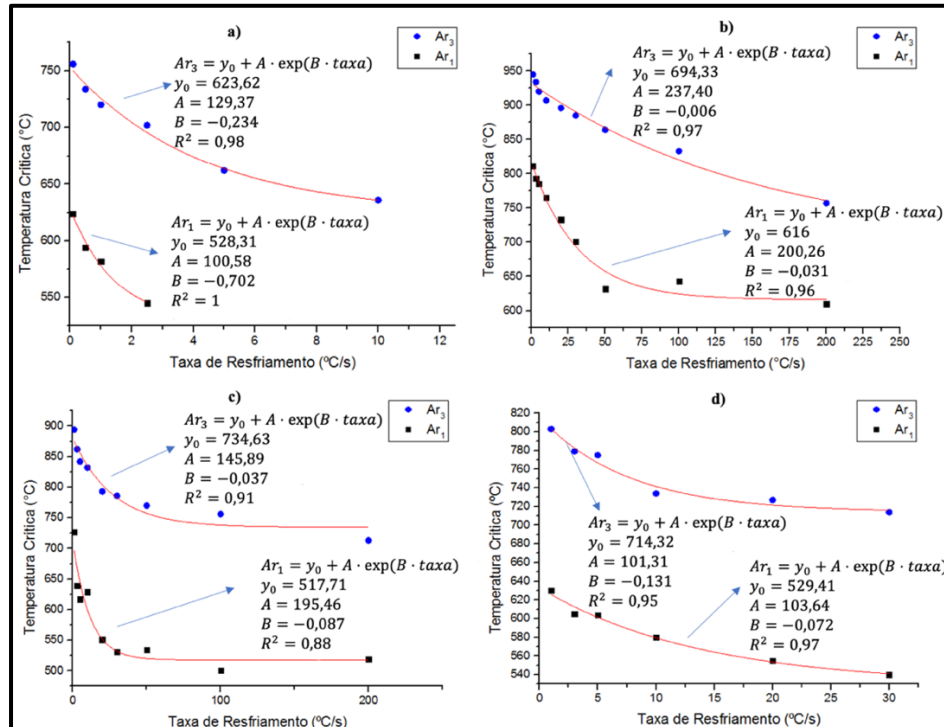


Figura 3.1. Modelo empírico ajustado aos dados experimentais para os aços: a) aço A; b) aço B; c) aço C; d) aço D.

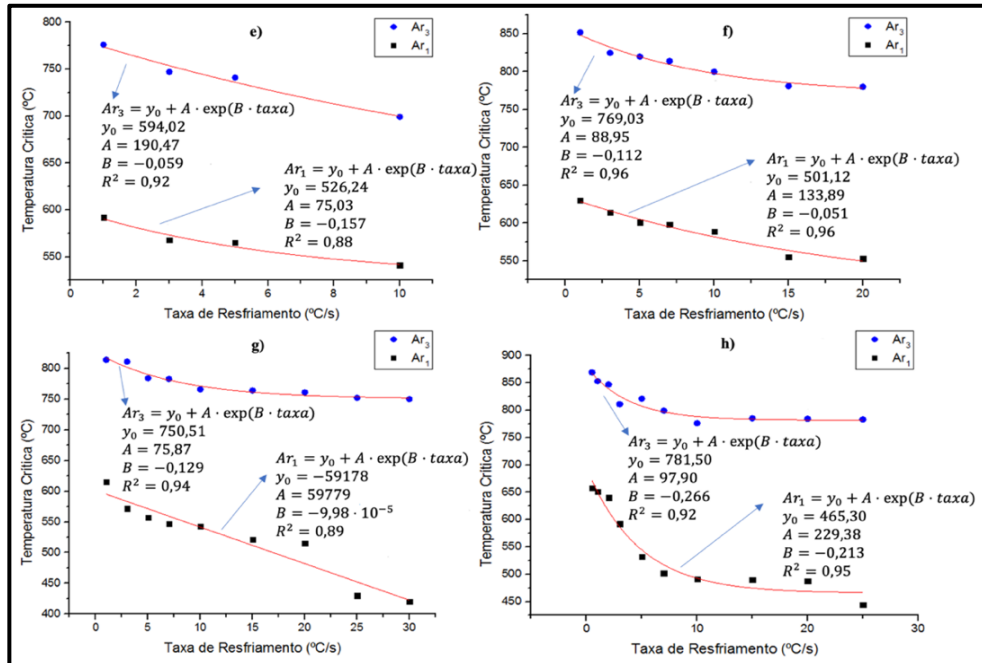


Figura 3.2. Modelo empírico ajustado aos dados experimentais para os aços: e) aço E; f) aço F; g) aço G; h) aço H.

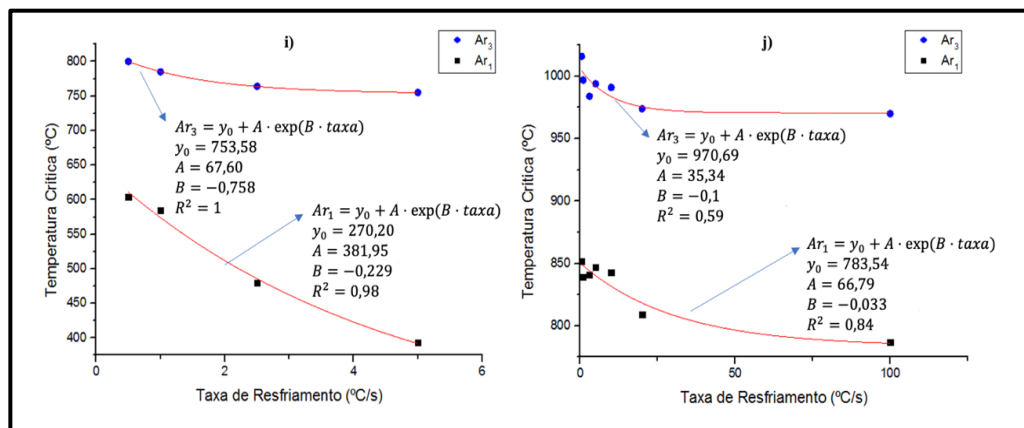


Figura 3.3. Modelo empírico ajustado aos dados experimentais para os aços: i) aço I; j) aço J.

Deve-se destacar que os ensaios de dilatometria são muito representativos se os corpos de prova forem bem amostrados. Geralmente a temperatura Ar_1 é muito sensível a presença de segregação química. Portanto, quando os dados oscilam muito com o aumento da taxa de resfriamento (Figuras 3.1 a 3.3), pode ser um indicativo de que corpos de prova (CPs) tenham sido amostrados em regiões diferentes de uma chapa. Assim sendo, alguns CPs podem ter sido amostrados em região de segregação positiva e outros de segregação negativa de algum elemento. Logo, os maiores desvios de temperaturas críticas com o aumento da taxa de resfriamento podem ser devidos à qualidade dos dados

medidos, o que evidencia o cuidado que se deve ter com a amostragem. Apesar disso, pode-se afirmar que os ajustes se mostraram satisfatórios para se fazer boas estimativas para aplicação em ambiente industrial.

3.2 Interpretação dos valores y_0 , A e B Obtidos por meio do Ajuste do Modelo Empírico aos Dados Experimentais

Pode-se perceber que, ao tomar o limite da Equação 1 com a taxa de resfriamento tendendo a zero, a temperatura crítica de transformação tende à $T = y_0 + A$. Assim, para taxas de resfriamento muito baixas, isto é, a transformação sendo tão lenta de modo que tenda ao equilíbrio termodinâmico, a temperatura T tenderá à temperatura de transformação no equilíbrio. É possível concluir que a constante B da equação proposta está relacionada com o efeito da taxa de resfriamento nas temperaturas A_{r3} e A_{r1} . Assim, por exemplo, quanto maior o módulo de B, maior a taxa de diminuição da temperatura crítica ($\frac{dT}{dtaxa}$). Essa observação pode ser feita ao se tomar a derivada total da Equação 1 com relação a taxa de resfriamento, que leva a $\frac{dT}{dtaxa} = A|B|\exp(|B| \cdot taxa)$.

O parâmetro y_0 da equação do modelo empírico (Equação 1) se relaciona ao valor mais baixo de temperatura que é mostrado no diagrama TRC, isto é, corresponde a aproximadamente o valor de temperatura crítica para quando a taxa de resfriamento é a mais alta. Basta tomar o limite da Equação 1 quando a taxa de resfriamento tende ao infinito, para verificar que a temperatura crítica T tenderá a y_0 . Em outras palavras, o parâmetro y_0 indica as temperaturas críticas A_{r3} e A_{r1} mais baixas, que correspondem, portanto, às taxas de resfriamento mais altas onde se verificará algum tipo de transformação difusional. Por exemplo, para o aço D, na taxa mais alta utilizada no ensaio de dilatométrica, que foi de 30 °C/s, a temperatura $A_{r1} = 540$ °C, enquanto $y_0 = 529,41$ °C, e $A_{r3} = 714,32$ °C enquanto $y_0 = 716,31$ °C. Assim, a temperatura crítica (A_{r3} ou A_{r1}) se aproxima de y_0 quando a taxa de resfriamento é alta, o que se verifica no exemplo anteriormente mostrado.

3.3 Determinação de Equações para A_{r3} e A_{r1} como Função da Composição Química e da Taxa de Resfriamento

Como já citado, existem na literatura tentativas de se criar equações que forneçam as temperaturas críticas como uma função da composição química do aço, sendo que algumas delas relacionam composição química e taxa de resfriamento ou de aquecimento (TRZASKA, 2016; SCHACHT, PRAHL e BLECK, 2016; PICKERING, 1986; CHOQUET, LEBON e PERDRIX, 1985; BLÁS *et al.*, 1989, ANDREWS, 1965). Porém, essas equações são válidas apenas para tipos específicos de aços e sob condições muito restritas.

Neste trabalho, utilizando o software Excel, foram executadas regressões lineares múltiplas para os parâmetros da Equação 1, aplicada a A_{r3} e A_{r1} , na tentativa de escrevê-los como funções da composição química, mais precisamente, como função das concentrações dos elementos C, Mn, Si, Cr, Ni, Mo e B (% em massa). Os resultados obtidos estão apresentados nas Tabelas 2 e 3. Deve-se destacar os bons coeficientes de correlação obtidos, comprovando que de fato os parâmetros apresentam forte influência da composição química.

Tabela 3.1. Parâmetros y_0 , A e B do modelo empírico proposto por Cezário escritos como função da composição química, para a previsão da temperatura de início da decomposição da austenita em constituintes difusionais (A_{r3}).

	Parâmetros em função da composição química	R^2	Desvio-padrão
A_{r3}	$y_0 = 963,06 - 208,85\%C - 180,86\%Mn + 72,041\%Si - 395,83\%Cr - 163,8\%Ni + 1517,28\%Mo + 71146,92\%B$	0,96	42
	$A = 35,65 - 7,69\%C + 101,64\%Mn - 126,23\%Si + 380,79\%Cr + 42,21\%Ni - 653,47\%Mo - 106453,15\%B$	0,84	52
	$B = -0,09 - 0,2\%C + 0,094\%Mn - 0,2\%Si + 0,15\%Cr + 0,17\%Ni - 0,49\%Mo - 509,99\%B$	0,99	0,05

Tabela 3.2. Parâmetros y_0 , A e B do modelo empírico proposto por Cezário escritos como função da composição química, para a previsão da temperatura de final de decomposição da austenita em constituintes difusionais (A_{r1}).

	Parâmetros em função da composição química	R^2	Desvio-padrão
A_{r1}	$y_0 = 795,3 + 50,94\%C + 2,79\%Mn - 1162,89\%Si + 33,24\%Cr + 187,08\%Ni + 976,21\%Mo - 249516,52\%B$	0,99	35
	$A = 42,62 - 277,97\%C - 73,77\%Mn + 1052,49\%Si + 148,57\%Cr - 556,53\%Ni + 124,7\%Mo + 170853,67\%B$	1	5
	$B = 0,09 - 0,59\%C + 0,075\%Mn - 0,55\%Si - 0,21\%Cr + 0,35\%Ni - 3,33\%Mo + 26,81\%B$	0,79	0,3

3.4 Comparação entre os diagramas TRC Experimentais e Aqueles Calculados pelo Modelo Empírico Avaliado

Para que a equação do modelo proposto por Cezário (2018) (Equação 1) possa ser utilizada para se determinar as temperaturas críticas A_{r3} e A_{r1} para um aço qualquer, é necessário que as constantes y_0 , A e B sejam previamente conhecidas para cada uma das temperaturas críticas. Assim, segundo o trabalho de Cezário (2018), essas constantes só poderiam ser obtidas por meio do ajuste exponencial da Equação 1 a um volume de dados experimental de temperatura crítica como função da taxa de resfriamento coletados para um aço específico, requerendo, portanto, que ensaios dilatométricos fossem feitos.

No presente trabalho, na tentativa inicial de criar uma equação que seja genérica e válida para qualquer aço (qualquer composição química, considerando o universo dos diferentes aços estudados), sem a necessidade de se utilizar uma base de dados experimentais, à partir dos parâmetros de ajuste y_0 , A e B obtidos para A_{r3} e A_{r1} dos dez aços, regressões lineares múltiplas foram executadas para escrever esses parâmetros como função da composição química, conforme foi mostrado nas Tabelas 3.1 e 3.2.

Portanto, bastaria que os dados de composição química (% em massa de cada elemento) fossem inseridos nas equações das Tabelas 2 e 3, que os parâmetros y_0 , A e B para A_{r3} e A_{r1} do modelo empírico proposto por Cezário (2018) fossem calculados. Na posse dos valores dos parâmetros y_0 , A e B (tanto para A_{r3} quanto A_{r1}) as temperaturas críticas de início e fim de transformação puderam ser facilmente calculadas como função da taxa de resfriamento ao se inserir esses valores na equação do modelo (Equação 1). Posteriormente, de posse das temperaturas críticas A_{r3} e A_{r1} , os instantes de tempo correspondentes ao início e fim da transformação puderam ser calculados à partir da Equação 5. Desta forma, os diagramas TRC dos dez aços estudados puderam ser calculados a partir, apenas, do uso de suas composições químicas como dados de entrada (Figuras de 3.4 a 3.6).

Nas Figuras 3.4, 3.5 e 3.6, os pontos denominados "medidos" são aqueles correspondentes aos dados experimentais. Aqueles denominados "calculados" são os obtidos por meio da utilização do procedimento anteriormente explicado. É notável que o modelo proposto nesse trabalho apresentou uma boa tendência. Alguns diagramas TRC praticamente se sobrepuseram (aço A, aço D, aço E, aço F, aço H, aço I e aço J). Para o aço C, as curvas se sobrepuseram para a temperatura A_{r3} , o que representa um excelente resultado. Mesmo para o aço B, uma boa tendência foi observada.

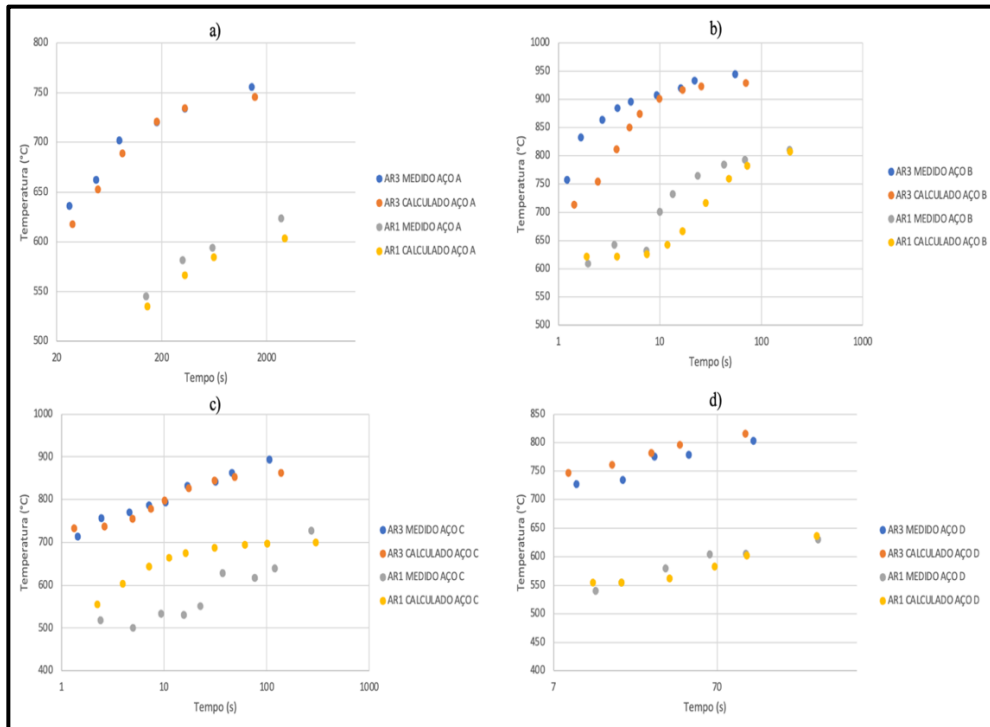


Figura 3.4. Diagrama TRC medido (real) e diagrama TRC calculado pelo modelo empírico como função da taxa de resfriamento e composição química; a) aço A; b) aço B; c) aço C; d) aço D.

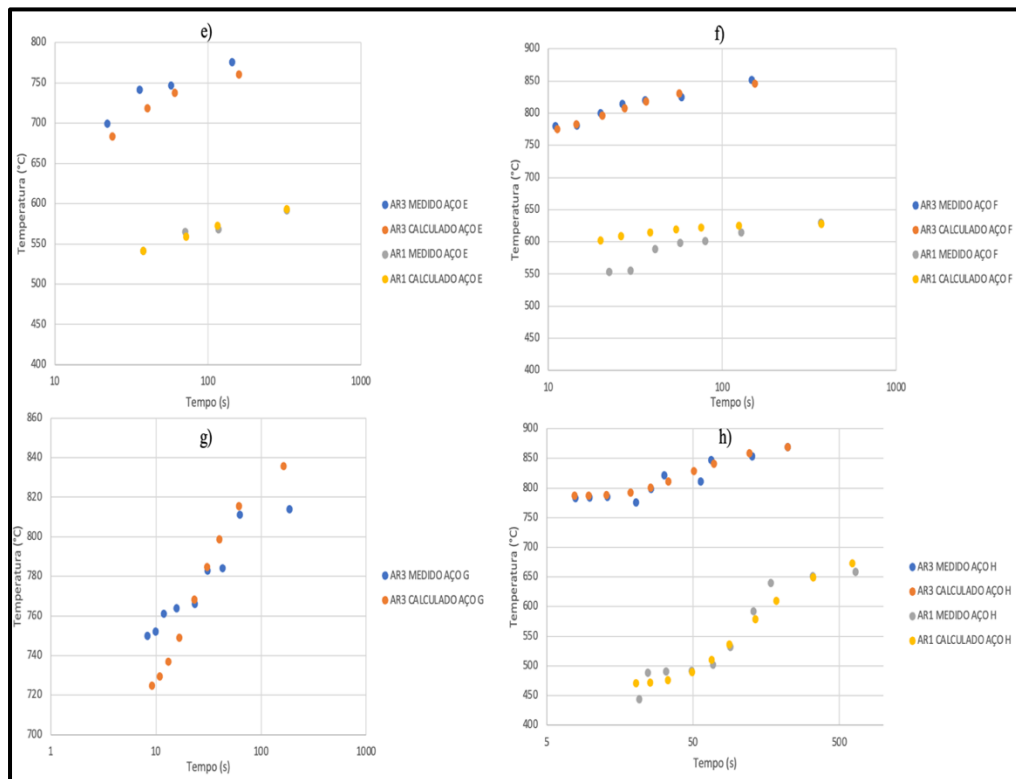


Figura 3.5. Diagrama TRC medido (real) e diagrama TRC calculado pelo modelo empírico como função da taxa de resfriamento e composição química; e) aço E; f) aço F; g) aço G; h) aço H.

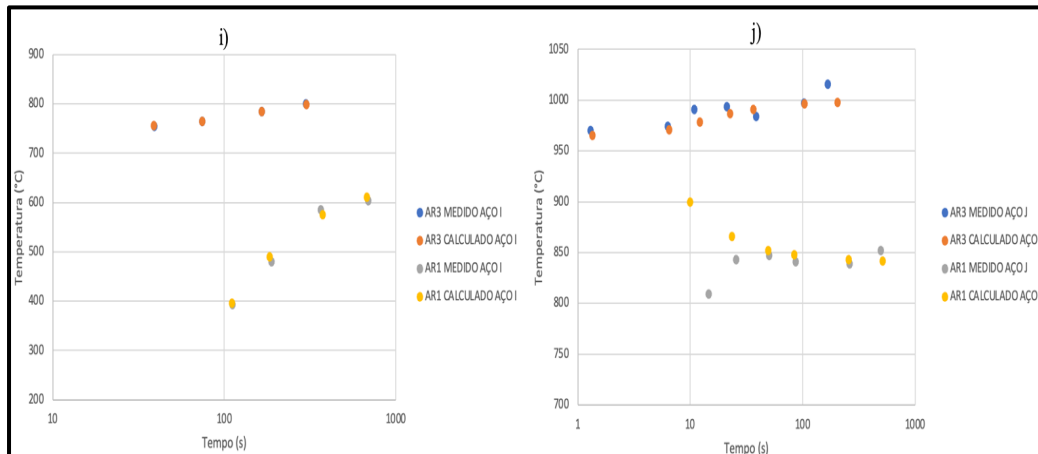


Figura 3.6. Diagrama TRC medido (real) e diagrama TRC calculado pelo modelo empírico como função da taxa de resfriamento e composição química; i) aço I; j) aço J.

É importante ressaltar que os aços estudados neste trabalho foram submetidos a condições de ensaios dilatométricos diferentes. Por exemplo, a temperatura de austenitização e o tamanho de grão austenítico prévio são dados muito importantes e que influenciam a posição das linhas do diagrama TRC. Quanto maiores as temperaturas de austenitização, há uma tendência de crescimento de grão austenítico, resultando na diminuição da energia de superfície associada aos contornos de grão. Sabe-se que a região dos contornos de grão são regiões preferenciais para nucleação de constituintes difusionais. Nesse sentido, um material com grãos austeníticos maiores tem menos sítios para nucleação de constituintes difusionais, e assim, há um retardo na sua cinética de nucleação, deslocando o diagrama TRC para a direita.

A austenitização completa depende da composição química do aço, bem como do tempo em que este permanece em uma dada temperatura. O carbono e outros elementos de liga precisam de tempo para entrarem completamente em solução sólida (AVNER, 1974). Porém, nesse estudo, cada aço foi resfriado a partir de uma temperatura de austenitização entre 25 °C e 50 °C acima de A_{c3} , que é uma prática usual em tratamentos térmicos, mas não garante a dissolução completa de precipitados e a homogeneização da microestrutura com relação a microsegregações.

Portanto, deve-se destacar que o modelo criado nessa pesquisa considerou apenas a composição química e as taxas de resfriamento para prever os diagramas TRC dos aços, sem considerar as diferentes condições de austenitização a que os aços foram submetidos, desprezando, portanto, o efeito explícito do tamanho de grão austenítico prévio. No

entanto, considerando situações em que não haja crescimento exagerado de grão austenítico, ou seja, cenários onde a temperatura de encharque na austenitização esteja entre 25 °C e 50 °C acima de A_{c3} , o presente modelo se mostrou satisfatório para os aços estudados.

4. CONCLUSÕES

O modelo empírico proposto por Cezário (2018) apresentou uma boa concordância com os dados experimentais de dilatométrica, permitindo prever as temperaturas críticas de início e fim de decomposição da austenita em constituintes difusionais como função da taxa de resfriamento;

O parâmetro y_0 do modelo empírico se aproxima das menores temperaturas críticas medidas, ou seja, aquelas associadas às maiores taxas de resfriamento. Portanto, pode-se afirmar que o parâmetro y_0 é um indicador das menores temperaturas em que a austenita se decompõe em constituintes difusionais;

Para taxas de resfriamento muito baixas, as temperaturas críticas de transformação calculadas pelo modelo empírico tendem a $T = y_0 + A$. Dessa forma, supõe-se que $y_0 + A$ seria então a maior temperatura de transformação possível, condição que mais se aproximaria de uma transformação no equilíbrio termodinâmico. Como y_0 está associada à menor temperatura possível em que transformações difusionais acontecem, o parâmetro A estaria associado ao maior grau de super-resfriamento possível da austenita que resulta na formação de constituintes difusionais;

Um modelo de regressão linear múltipla foi proposto para prever os diagramas TRC como função da composição química dos aços, e esse se mostrou promissor para o cálculo das temperaturas críticas Ar_3 e Ar_1 como função da taxa de resfriamento;

As condições dos ensaios dilatométricos completamente diferentes para cada um dos aços pode ter influenciado nos resultados, principalmente no que tange aos desvios padrão. Uma otimização desses resultados poderia ser feita, por exemplo, ao se começar o resfriamento a partir de uma austenita com o mesmo tamanho de grão para cada aço. No entanto, destaca-se que mesmo neste cenário, a aderência entre os dados experimentais e os calculados pelo modelo foi bastante satisfatória. Isso indica que, desde que não haja crescimento de grão austenítico pronunciado, o modelo proposto apresenta resultados satisfatórios, sinalizando que estudos posteriores, com um espaço amostral maior certamente serão válidos em busca de refiná-lo.

AGRADECIMENTOS

À UFOP, pelo ensino público de qualidade.

Aos meus irmãos que tanto amo e de onde sempre tirei forças para continuar, Thawan e Mateus.

Ao professor Geraldo, por ter me ensinado tanto.

Aos companheiros de curso que me ajudaram, seja com conselhos ou com questões acadêmicas: Hedpo, Filipe, Luiz, Jeilce, Amanda, Daynara, Paulo.

À Melissa, por ter me dado forças durante momentos difíceis da minha vida.

Ao Alysson, por todo o amor e compaixão.

Ao professor Leonardo, por ter me aberto portas.

5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AVRAMI M. Kinetics of phase change I. **Journal of Chemical Physics**, vol 7, pp. 1103-1112, 1939.

BOK, H.H.; KIM, S.N.; SUH, D.W.; BARLAT, F.; LEE, M.G. Non-isothermal kinetics model to predict accurate phase transformation and hardness of 22MnB5 boron steel. **Mater Sci Eng A**. 2015;626(73):67-73.

CABALLERO, F.G.; CAPDEVILA, C.; ANDRÉS, C.G. Modelling of Kinetics of Austenite Formation in Steels with Different Initial Microstructures. **ISIJ International**, Vol. 41 (2001), No. 10, pp. 1093–1102.

CARDOSO, R.A.; FARIA, G.L. Characterization of austenite decomposition in steels with different chemical concepts and high potential to manufacture seamed pipes for oil and gas industry. **Materials Research**. 2019;22(5):e20190378.

CEZÁRIO, A.L.S.; PORCARO R.R.; FARIA G.L. Proposition of an empirical model for determination of critical temperatures during continuous cooling in heat affected zones of IF steels welded by the TIG Process. **Soldagem e Inspeção**. 2019;24:1-14.

CEZARIO, A.L.S. **Caracterização e avaliação de modelos de previsibilidade da cinética de transformação de fases austenita/ferrita de três aços IF**, 111p. Dissertação de Mestrado, Rede Temática em Engenharia de Materiais, Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, Brasil, 2018.

GHOSH, S.; SINGH, A.K.; MULA, S. Effect of critical temperatures on microstructures and mechanical properties of Nb-Ti stabilized IF steel processed by multiaxial forging. **Materials and Design**. 2016;100:47-57.

GÓMEZ, M.; MEDINA, S.F.; CARUANA, G. Modelling of phase transformation kinetics by correction of dilatometry results for a ferritic Nb-microalloyed steel. **ISIJ International**. 2003; 43(8):1228- 1237.

JOHNSON, W.A.; MEHL, R.F. **Reaction kinetics in processes of nucleation and growth**. Transactions of the Metallurgical Society of AIME, vol. 135, p. 416-441, 1939.

KOHOUT J. An alternative to the JMAK equation for a better description of phase transformation kinetics. **Journal of Materials Science**. 2008; 43(4):1334-1339.

KOLMOGOROV, A.N. Sobre a teoria estatística da cristalização de metais. **Izv. Akademii Nauk SSSR**, vol. 1, p. 355, 1937

KOTSAR, S.L *et al.* Tekhnologia Listoprocatnogo Proizvodstva (Technology of Sheet Rolling Production). **Metallurgiya, Moscow.**, 1997, 277 p.

KRAUSS, G. **Steel: Processing, Structure, and Performance**. 2nd. ed. United States of America: ASM International, Materials Park, 2015. 704 p.

PICKERING, F.B.: **Steels: Metallurgical Principles**. In: Encyclopedia of Materials Science and Engineering, vol. 6, The MIT Press, Cambridge, 1986.

POHJONEN, A.; SOMANI, M.; PORTER, D. Modelling of austenite transformation along arbitrary cooling paths. **Comput Mater Sci**. 2018;150:244-51.

RODRIGUES, K.F.; FARIA, G.L. Characterization and Prediction of Continuous Cooling Transformations in Rail Steels. **Materials Research**. 2021; 24(5): e20200519

SCHACHT, K.; PRAHL, U.; BLECK, W. Material Models and their Capability for Process and Materials Properties Design in Different Forming Processes. **Materials Science Forum**, 854, 2016, 174-182.

TRZASKA, J. Calculation of Critical Temperatures by Empirical Formulae. **Archives of Metallurgy and Materials**, 61:2B, 2016, 981-986.