

MODELAGEM MATEMÁTICA DO FENÔMENO DE DESCARBONETAÇÃO NO PROCESSO DE REaquecimento DE TARUGOS DE AÇO SAE1070¹

Wilson de Assis Gouveia²
Carlos Antonio da Silva³
Itavahn Alves da Silva³
Expedito Felício de Barros Alves⁴
Joaquim Gonçalves Costa Neto⁵

Resumo

O aço SAE1070, utilizado no segmento automotivo, tem especificações rígidas e uma delas se relaciona à descarbonetação, que se refere à perda de parte do carbono do aço por uma combinação de mecanismos de difusão e oxidação. Alguns dos parâmetros que influenciam a descarbonetação são: temperatura, potencial de oxigênio da atmosfera, gradiente de potencial químico de carbono e tempo de exposição às altas temperaturas. A oxidação pode influenciar na medida da descarbonetação que é realizada a partir da interface metal/óxido, pois a mesma consome o aço fazendo que essa interface seja deslocada para dentro da amostra. Grandes esforços são conduzidos durante o reaquecimento de tarugos para laminação para que não ocorra tal fenômeno ou para que se consiga minimizá-lo, mantendo-o dentro de padrões aceitáveis. Como muitas vezes experimentos em escala industrial são inviáveis, a modelagem matemática baseada em resultados de experimentos laboratoriais se faz atraente, orientação seguida neste trabalho. Foram realizados ensaios em forno elétrico em condições isotérmicas de 600°C a 1.100°C e tempos de 2 horas a 48 horas. A descarbonetação e oxidação foram medidas por meio de microscópio ótico. Criou-se um algoritmo e em seguida foram ensaiadas amostras no forno industrial para validação e adequação do modelo. Com as devidas adequações realizadas, o modelo detém acurácia satisfatória.

Palavras-chave: Descarbonetação; Modelagem matemática; Oxidação.

MATHEMATICAL MODELING OF DECARBURIZATION PHENOMENON DURING REHEATING PROCESS OF SAE1070 STEEL BILLETS

Abstract

The SAE1070 steel grade – used in automotive industry – has restricts specifications and some of them are limits to oxidation and decarburization, which refers to carbon loss through a variety of diffusion mechanisms. Temperature, atmosphere oxygen potential, carbon chemical potential gradient and time of high temperature exposure are some of parameters that may influence the decarburization. The oxidation may influence the decarburization losses, which is held from the metal/oxide interface, because it consumes the steel moving this interface into the sample. During the reheating of billets for hot rolling, considerable efforts are conducted to avoid this phenomenon or at least minimize it, keeping it within acceptable pattern. As most of times industrial scale experiments are impractical, a mathematical modeling based on the results of laboratory experiments becomes attractive and this was the orientation followed in this work. Isothermal tests on electric oven with temperature ranging from 600°C to 1,100°C and time ranging from 2 hours to 48 hours were held. Decarburization and oxidation were measured by optical microscopy. An algorithm was developed and then was applied in industrial tests with samples for validation of the model. Once the adjustments are made, the model shows satisfactory accuracy.

Key words: Decarburization; Mathematical modeling; Oxidation.

¹ Contribuição para o 67º Congresso da ABM.

² Mestrando em Engenharia de Materiais, Eng. metalúrgico da ArcelorMittal Monlevade.

³ MSc PHD em Engenharia Metalúrgica e Materiais, Professor da Redemat, UFOP.

⁴ MBA Gestão empresarial. Gerente de laminação e logística, ArcelorMittal Monlevade.

⁵ Doutor em Eng. Mecânica. Gerente da Assistência técnica, ArcelorMittal Monlevade.

1 INTRODUÇÃO

A produção e utilização de aço vêm aumentando sistematicamente ao longo dos anos e com elas os esforços de otimização de processos e produtos. Uma das vertentes tem sido a utilização de materiais de maior qualidade e de menores pesos, para atender às mesmas aplicações que antes. Com isso pode-se, por exemplo, projetar e construir automóveis que consomem menos combustível e, conseqüentemente, poluem menos o meio ambiente. Modo geral os processos de conformação acrescentam qualidade ao produto, embora possam ser causa de problemas específicos. No caso do processo de conformação utilizado na ArcelorMittal Monlevade (AMM), que é a laminação de fio-máquina, problemas específicos são: descarbonetação, palha, dobra, falhas dimensionais. O fio-máquina é obtido através da laminação do tarugo, que tem seção quadrada com dimensões de 155 mm x 155 mm e 12,4 m de comprimento, advindos do lingotamento contínuo. O forno de reaquecimento de tarugos, onde se observa a descarbonetação foco deste estudo, tem capacidade de 130 tarugos e nas diferentes posições do forno são observadas diferentes condições de temperatura e teor de oxigênio, monóxido e dióxido de carbono, oriundos da queima dos gases combustíveis. Os principais receios quanto à eficiência do processo de controle da descarbonetação se encontram nas paradas programadas e paradas acidentais. Têm-se coletado ao longo de anos e analisado estatisticamente com dados de descarbonetação obtidos das análises metalográficas, valores de parâmetros de processo do forno de reaquecimento, no entanto, ainda não se pode chegar a conclusões que viabilizem uma otimização eficaz para o processo.

2 REVISÃO

A descarbonetação sob ação de atmosfera oxidante retira carbono das partes periféricas do fio-máquina e ocorre simultaneamente à oxidação que produz uma camada de carepa, com preponderância de $Fe_{0,95}O$, comparativamente aos óxidos superiores, Fe_3O_4 e Fe_2O_3 . A parte externa do fio máquina, onde se concentram os esforços de tração e compressão, tem sua resistência comprometida como consequência da descarbonetação, o que implica em restrições impostas pelo consumidor à profundidade da porção atingida.

A Figura 1 apresenta, como exemplo, aspectos da descarbonetação de fio-máquina, que na AMM é classificada em classe 1 e classe 2. A descarbonetação de classe 1 é caracterizada por uma faixa de grãos colunares de ferrita (fase clara); a descarbonetação de classe 2 é caracterizada por grãos de ferrita dispersos na matriz da perlita (fase escura) sem isolar a perlita da superfície (ou interface metal/óxido).

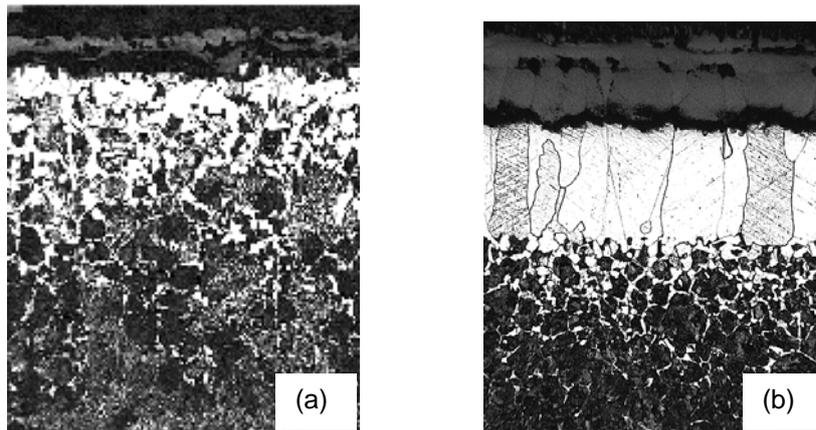


Figura 1. Dois tipos de descarbonetação ocorridas em fio-máquina, (a) é de classe 2; e (b) classe 1 (ou total).

É comum em um tratamento simplificado, assumir que se trata de um processo competitivo de crescimento da camada de óxido e de perda de carbono na interface metal/óxido controlados por difusão, embora possa ser oferecido um tratamento detalhado dos fenômenos envolvidos, em termos de influência dos defeitos estruturais presentes na camada de óxido e do papel dos vários mecanismos de difusão no seio do metal.

Birks, Meier e Pettit,⁽¹⁾ Birks e Jackson,⁽²⁾ Birks e Nicholson⁽³⁾ e Ichihara e Nuri⁽⁴⁾ apresentam modelagem da difusão de carbono levando-se em consideração a influencia da oxidação, na medida em que esta consome uma determinada camada de aço, fazendo com que a interface metal/óxido se desloque para dentro da amostra à medida que a oxidação aumenta. O tempo, temperatura e atmosfera são fundamentais para determinação da quantidade de metal removido por oxidação e conseqüentemente a profundidade descarbonetada medida.

A Figura 2 apresenta o perfil presumido de concentração de carbono, de acordo com a análise de Birks, Meier e Pettit.⁽¹⁾ A posição inicial da interface se situa em $x = 0$; a formação da camada de carepa faz com a interface metal/óxido se movimente até a posição $x = X$.

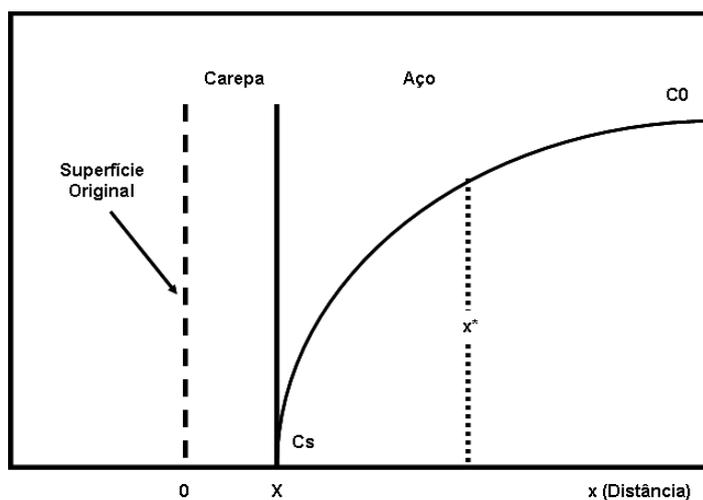


Figura 2. Perfil da concentração de carbono durante oxidação e descarbonetação simultâneas.⁽¹⁾

A solução para o problema de difusão de carbono, válida para todo $x > X$, é dada pela seguinte equação.⁽¹⁾

$$\frac{C_0 - C}{C_0 - C_s} = \frac{\operatorname{erfc}\left[\frac{x}{2\sqrt{Dt}}\right]}{\operatorname{erfc}\left[\frac{X}{2\sqrt{Dt}}\right]} \quad (1)$$

Na Equação 1, C_0 é a concentração do centro da amostra; C_s é a concentração na interface metal-óxido (esta concentração pode ser considerada desprezível, nas condições destes ensaios que envolvem altas temperaturas e contato com óxido); erfc é complemento da função erro Gaussiano ($\operatorname{erfc} = 1 - \operatorname{erf}$), x é a posição analisada em referência à interface metal/óxido original; D é o coeficiente de difusão do carbono no metal; t é o tempo; X fornece a profundidade de metal removido devido à formação de óxido; x^* representa a posição teórica da interface entre as regiões descarbonetada e sem descarbonetação.

Pode se descrever a posição X da interface metal óxido pela constante K_C , em casos de cinética controlada por difusão na camada de óxido.

$$\frac{dX}{dt} = \frac{Kc}{X} \quad \text{ou} \quad X = (2Kct)^{1/2} \quad (2)$$

Para a modelagem matemática da descarbonetação em altas temperaturas é usual observar na literatura⁽¹⁻³⁾ que se desconsidera a descarbonetação ocorrida abaixo de 910°C, que se refere ao campo de estabilidade da Ferrita e/ou campo bifásico (Ferrita + Austenita), por ser esta insignificante quanto comparada com a descarbonetação na região austenítica.

O limite entre a camada descarbonetada e a matriz, posição x^* na Figura 2, também é um fator questionado e adotado por cada autor conforme sua especificidade. Alguns utilizam o percentual de 90%⁽³⁾ da concentração média de carbono da matriz, enquanto outros consideram até 70%⁽²⁾ desta concentração como fronteira. Os métodos de medição da descarbonetação também variam conforme os diversos autores. Uns utilizam análise de perfil de microdureza,⁽⁵⁾ uma vez que a dureza tem correlação direta com o percentual de carbono, outros utilizam análise via metalografia^(2,3) ou até mesmo por meio de SIMS (*Secondary Ion Mass Spectroscopy*).⁽⁵⁾ Ainda observa-se que, para simplificação dos cálculos, a variação do coeficiente de difusão com a temperatura também é negligenciada. Sabe-se que o coeficiente de difusão varia com a concentração de carbono, mais lentamente na região de baixos teores de carbono e mais rapidamente na região de teores mais elevados de carbono.⁽⁶⁾

Alguns dos ensaios de Birks e Jackson⁽²⁾ e Birks e Nicholson⁽³⁾ foram realizados primeiramente em condições isotérmicas. Este, ao desenvolver o modelo de descarbonetação, utilizou o conceito de incremento de descarbonetação em cada temperatura para simular o aquecimento de tarugos de forma contínua; desta forma, após alguma adequação, o modelo obteve boa acurácia.

Apesar dos bons resultados com a utilização de coeficiente de oxidação obtidos da literatura, como foi o caso de Birks e Jackson,⁽²⁾ Birks e Nicholson⁽³⁾ e Ichihara e Nury⁽⁴⁾ sugerem a obtenção de parâmetros específicos de oxidação para cada aço em estudo.

Segundo Mayott,⁽⁷⁾ a profundidade da descarbonetação é maior para temperaturas mais altas e pequeno efeito da concentração de oxigênio foi observado na profundidade da descarbonetação. A espessura da carepa é significativamente menor em concentrações de oxigênio menores apesar de pequena influência da temperatura. Para tais observações, foram realizados testes com faixa de

temperatura de 800°C, 900°C e 1.000°C e concentração de oxigênio, 21%, 14% e 7% volumétrico.

3 MATERIAIS E MÉTODOS

A composição química do aço escolhido para este estudo, SAE1070, é apresentada na Tabela 1.

Tabela 1. Faixa de composição química do aço SAE1070*

S	C	Mn	P	Si	Al	Cr	Cu
0,030 máx	0,690 - 0,740	0,450 - 0,650	0,030 máx	0,150 - 0,300	0,008 máx	0,100 máx	0,100 máx

* Norma interna da ArcelorMittal Monlevade

Retiraram-se 120 amostras com dimensões aproximadas 30 mm x 30 mm x 10 mm de um tarugo do aço SAE1070 para a execução dos ensaios laboratoriais. Para obtenção destas amostras, cortaram-se 10 fatias contendo seções transversais e em seguida extraíram-se 12 amostras de cada fatia (Figura 3). Assim, todas as amostras têm uma face correspondente à superfície do tarugo e as demais são faces internas do tarugo. A análise do laboratório interno da AMM quantifica 0,7% em peso de carbono para as amostras.



Figura 3. Esquema de corte de amostras de seções transversais de tarugos do aço SAE1070.

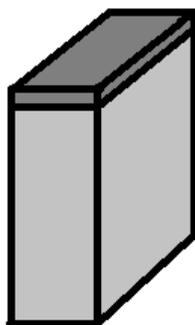


Figura 4. Esquema de medição de profundidade de descarbonetação e espessura da camada de óxido.

Mediram e pesaram-se as amostras em balança de precisão após a remoção da camada de óxido original do lingotamento para posterior obtenção do coeficiente de oxidação. O esquema da Figura 4 ilustra como se encontra a camada de óxido nas amostras (camada escura).

Realizaram-se os ensaios de aquecimento das amostras em fornos elétricos do tipo Mufla, com controlador eletrônico de temperatura, cuja faixa de trabalho pode variar de 30°C a 1.200°C, com variação de +/- 5°C. O forno possui duas entradas de ar,

uma na tampa e outra no fundo, e não é hermético, o que permite que a atmosfera seja renovada em relação à oferta de oxigênio.

Os tempos de aquecimento e encharque são de 2 h, 4 h, 8 h, 16 h, 24 h e 48 horas, nas temperaturas de 600°C, 700°C, 750°C, 800°C, 850°C, 900°C, 950°C, 1.000°C, 1.050°C e 1.065°C. Um resumo das condições experimentais é mostrado na Tabela 2.

Tabela 2. Planejamento de experimentos de aquecimento do aço SAE1070

Temperatura (°C)	Tempo (h)					
	2	4	8	16	24	48
600		x	x		x	x
700		x	x		x	x
750	x	x		x	x	
800	x	x		x	x	
850	x	x		x	x	
900	x	x		x	x	
950	x	x		x	x	
1000	x	x		x	x	
1050	x	x		x	x	
1065	x	x		x	x	

As amostras são retiradas do forno e resfriadas ao ar livre uma vez decorrido o período de aquecimento e encharque.

Realiza-se a medição da oxidação nas amostras através da diferença de peso da amostra antes de ser submetida ao aquecimento e após a remoção da carepa formada no forno. Realiza-se a remoção da carepa com o auxílio de escova de aço rotativa e na sequência, um banho de ácido clorídrico dissolvido em água na concentração de 20% em volume, aquecido a 60°C durante 10 minutos com objetivo de eliminar a carepa remanescente do processo de escovação.

Utilizam-se os dados de diferença de peso e área superficial das amostras para inferir a profundidade média de metal removido pela oxidação e consequente determinação do coeficiente de oxidação do aço. Com os dados de profundidade, p , emprega-se a equação seguinte⁽⁴⁾ para a determinação de K_C .

$$K_C = \frac{p^2}{2t} \quad (3)$$

Na Equação 3, K_C é o coeficiente de oxidação, p é a profundidade de material removido pela oxidação e t é o tempo. Então a espessura de carepa formada é calculada como:

$$X = \sqrt{K_C * 2t} \quad (4)$$

A medição da descarbonetação é feita através do método visual, que é a análise realizada através do microscópio ótico no laboratório de metalografia da AMM. A norma ASTM E1077⁽⁸⁾ de determinação de profundidade de descarbonetação é utilizada como referência para avaliação visual.

Utiliza-se o coeficiente de difusão do carbono na austenita da literatura⁽⁹⁾ (Equação 5).

$$D = 0,372e^{\left(\frac{-17816}{T}\right)} \text{cm}^2\text{s}^{-1} \quad (5)$$

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 5 apresenta dados relativos à profundidade de aço removido por oxidação em função do tempo e temperatura de exposição ao meio oxidante. Estes dados permitem encontrar os valores da constante de oxidação, K_c , que, como esperado, varia exponencialmente com a temperatura (Figura 6). A Equação 6 é uma relação funcional aplicável a este aço.

$$K_c = 0,367e^{\left(\frac{-171539}{RT}\right)} \text{ (cm}^2 \text{ s}^{-1}) \quad (6)$$

Na Equação 6, R é a constante universal dos gases (8,314 J.mol⁻¹.K⁻¹) e T a temperatura absoluta (K).

A Tabela 3 mostra valores obtidos para energia de ativação de oxidação (“Q”) e constante pré-exponencial (“B”) por diversos autores, de acordo com Suarez,⁽¹⁰⁾ assim como os valores determinados neste trabalho, os quais estão em bom acordo com aqueles de Birks, Meier e Pettit,⁽¹⁾ Birks e Jackson,⁽²⁾ Birks e Nicholson.⁽³⁾

Tabela 3. Valores de energia de ativação e constante pré-exponencial

	Q (kJ/(mol*K))	B (cm ² /s)
Abuluwefa et al	73,1	5,60E-4
Birks and Nicholson	180,6	0,571
Browne et al	124,7	2,95E-3
Kubascheski and Hopkings	137,9	7,1.e ⁻²
Paüdassi	162,3	6,1
Stanley et al	138,0	3,90E-2
Munther and Lenard	120,0	-
Sansonav	124,0	-
Este trabalho	171,5	0,367

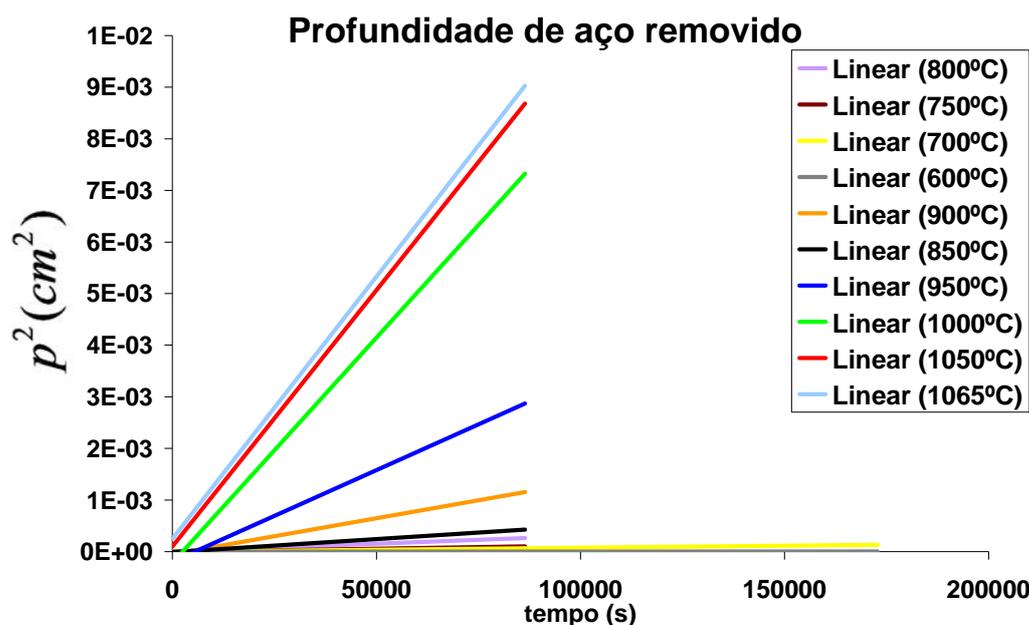


Figura 5. Profundidade de aço removido devido à oxidação durante aquecimento em função de tempo.

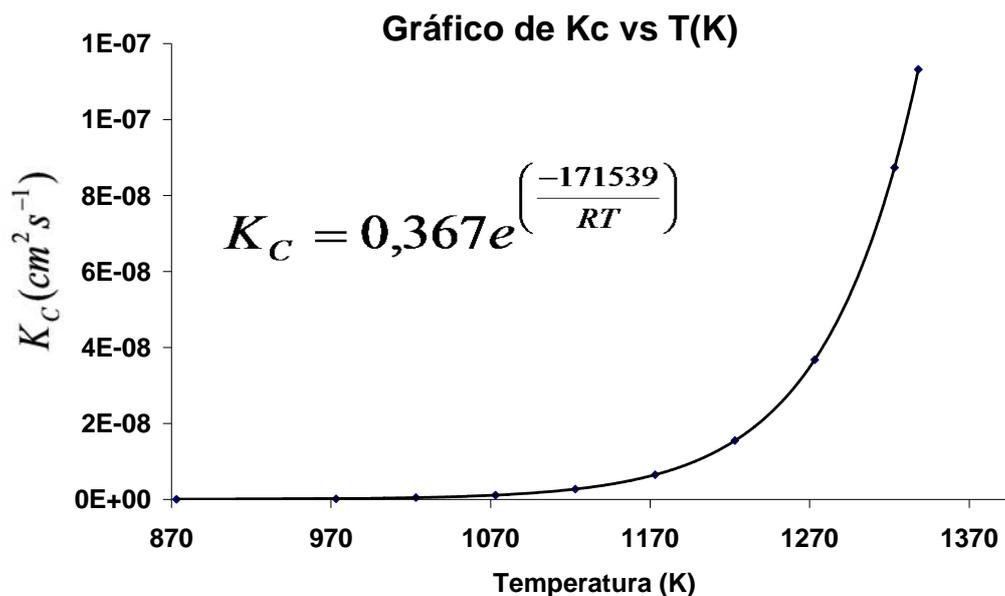


Figura 6. Dependência entre K_c e Temperatura.

A Figura 7 mostra como varia a profundidade de descarbonetação medida experimentalmente (método visual), DC, sob as várias condições experimentais, em função do tempo. A Figura 8 mostra o perfil de dureza, que é diretamente correspondente à descarbonetação, medido desde a interface metal/óxido até o centro da amostra. A correlação entre a profundidade de descarbonetação média observada visualmente e o percentual de carbono relativo à matriz (C_0), seguindo-se o perfil de dureza da Figura 8, sugere que tal profundidade corresponda a 41% do carbono da matriz. Para o caso da descarbonetação máxima, este valor é 75% do carbono da matriz, o que é coerente com Birks e Nicholson.⁽³⁾

Observa-se que para temperaturas abaixo de 850°C a descarbonetação encontrada pode ser considerada desprezível, mesmo para tempos elevados como 48 h. Desta forma, adotam-se, para questão de cálculo, apenas temperaturas acima de 850°C, que corresponde à temperatura cuja fase equivalente seria austenita pura.^(2,3)

A solução da 2ª lei de Fick (Equação 1), utilizando os valores indicados de coeficiente de difusão (Equação 5), de constante cinética de oxidação (Equação 6), e assumindo a posição teórica da fronteira de descarbonetação, x^* , em $0,40 C_0$ geram dados que têm boa concordância com a profundidade de descarbonetação observada visualmente (Figura 9).

Nesta Figura a profundidade de descarbonetação prevista pela solução da 2ª Lei de Fick é representada pela Equação 7, que é a diferença entre o valor teórico da posição da fronteira da região descarbonetada e a profundidade de formação de carepa (Figura 2).

$$DC_{teórica} = x^* - X \quad (7)$$

Análise de regressão múltipla entre temperatura, tempo e valores de descarbonetação média permite que se obtenha a Equação 8 que possibilita prever a descarbonetação média das amostras para faixa de temperatura de 850°C a 1.065°C e tempo variando entre 2h e 24h em condições isotérmicas.

Descarbonetação vs tempo

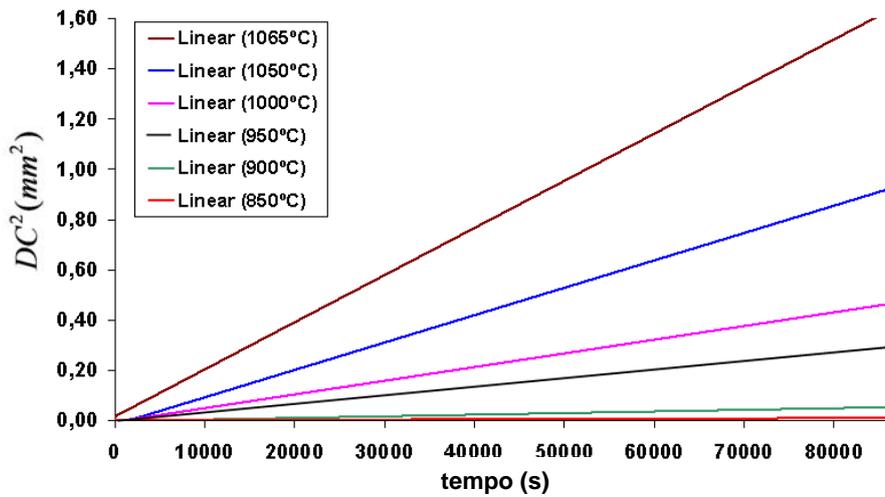


Figura 7. Profundidade de descarbonetação medida experimentalmente versus tempo.

Perfil de Microdureza Percentual de dureza relativa à máxima (matriz)

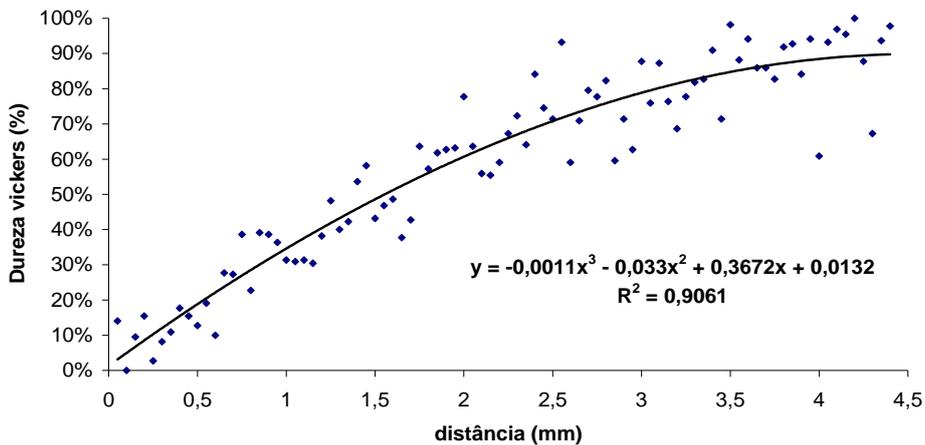


Figura 8. Perfil típico de dureza medida a partir da interface metal-óxido.

Comparativo entre (DC teórico) e (DC real) 2a Lei de Fick

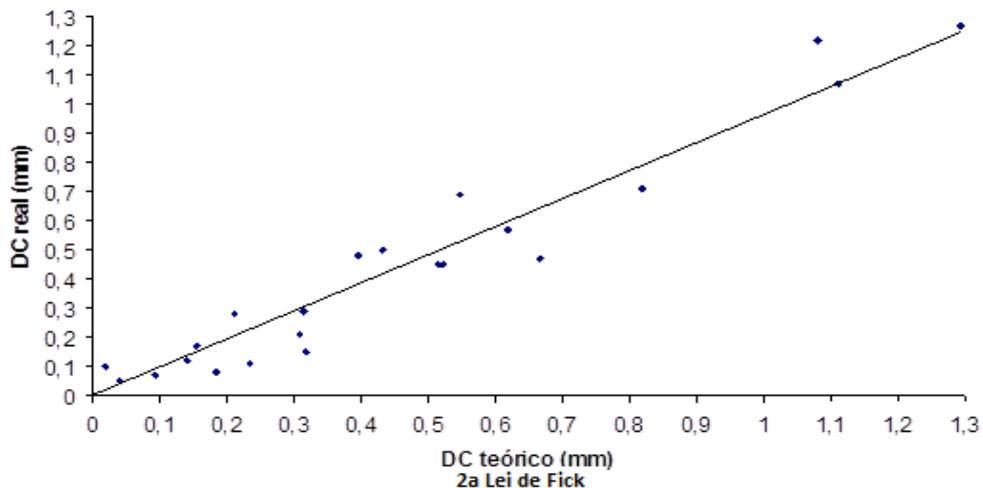


Figura 9. Comparativo entre profundidade prevista via solução da 2ª Lei de Fick e a profundidade observada de descarbonetação.

A Figura 10 mostra o comparativo de resultados da descarbonetação real versus descarbonetação prevista pela equação de regressão.

$$DC = 303,8 t^{1/2} * e^{\left(\frac{-15013}{T}\right)} \quad (\text{mm}) \quad (8)$$

Na Equação 8, DC é a profundidade da descarbonetação, T é a temperatura em kelvin e t é o tempo em segundos.

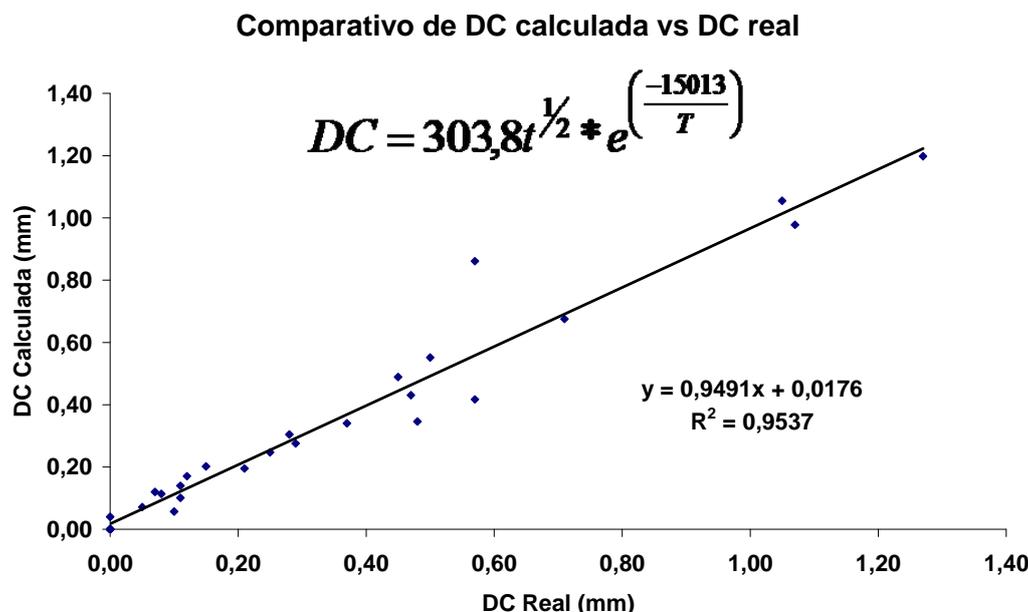


Figura 10. Profundidade prevista de descarbonetação (DC calculada via equação de regressão) e profundidade de descarbonetação observada (DC real).

Note-se que a forma da Equação 8 é aquela que permite estimar a profundidade de penetração em um processo difusivo em barra semi-infinita (Equação 9), embora os valores de energia de ativação sejam divergentes.

$$\delta = K \sqrt{D_c t} = A t^{1/2} e^{-B/T} \quad (9)$$

5 CONCLUSÃO

O método de determinação da constante de oxidação mostra-se capaz de prever a profundidade de metal removido devido à oxidação, ou seja, o deslocamento da interface metal/óxido para dentro da amostra.

Os cálculos para previsão da descarbonetação utilizando-se do coeficiente de difusão extraído da literatura, a constante cinética de oxidação específica do aço em questão, e a solução da 2^a Lei de Fick mostram-se condizentes com os valores observados.

A adoção da ocorrência simultânea da oxidação e descarbonetação para o aço SAE1070, na solução da segunda lei de Fick, permite que se desenvolva algoritmo para dedução da profundidade da descarbonetação observada através do microscópio ótico, que obtém bons resultados na predição dos valores reais.

Com isso, conclui-se que a metodologia de modelagem matemática do fenômeno de descarbonetação para o aço SAE1070, assim como para outros tipos de aço, durante o processo de reaquecimento é viável, eficiente e pode ser utilizada nas situações reais de reaquecimento de tarugos para laminação a quente, possibilitando melhor entendimento e conseqüente aperfeiçoamento do processo.

Agradecimentos

Os autores agradecem à ArcelorMittal Monlevade, à Redemat – UFOP pelo suporte e a todos que, de alguma forma, contribuíram para execução deste trabalho, em especial às pessoas de Júlio de oliveira Gonçalves, Lázaro Augusto Barros Barbosa, Ângelo Marcos Bueno Araújo, Sebastião D'Ávila Silva, Ronaldo Felisberto de Oliveira, Genivaldo Paulo de Matos, Ricardo Corrêa Botelho, Warley César Barbosa, Francisco José Martins Boratto, Marília Brum Nascimento, Jairo Átila Alvarenga, Paulo Henrique Santiago, Leandro Aparecido Marchi, Fábio da silva Borchardt, Amanda Christina Gonçalves do Carmo Gouveia e Saulo do Carmo Gouveia.

REFERÊNCIAS

- 1 N. BIRKS, G. H. MEIER and F. S. PETTIT, Introduction to the high-temperature oxidation of metals, second edition, Cambridge University Press, 2009
- 2 N. BIRKS and W. JACKSON, Quantitative treatment of simultaneous scaling and decarburization of steel, Journal of Iron and Steel Institute, (1970), 81.
- 3 N. BIRKS and A. NICHOLSON, Calculation of decarburization depth in steels reheated under practical conditions, ISI Publication 123, London, (1970), 219.
- 4 A. ICHIHARA and Y. NURI, Analysis of Decarburization Phenomena during Heating and Rolling of Billets, Sanyo Technical Report Vol.8 (2001) No.1
- 5 J. CERMAK and L. KRAL, Low-Temperature diffusion of carbon in iron measured by SIMS technique, Roznov pod Radhostem, Czech Republic, EU (2010).
- 6 C. WELLS et al., Diffusion Coefficient of Carbon in Austenite, Journal of Metals, Transactions Aime, Vol. 188 (1950), 553 – 560.
- 7 S. W. MAYOTT, Analysis of the Effects of Reduced Oxygen Atmospheres on the Decarburization Depths of 300M Alloy Steel. 2010. 89 pages. Thesis (Master of Science – Materials Science and Engineering) Faculty of Rensselaer Polytechnic Institute.
- 8 ASTM Standard E1077-01, 2005, "Standard Test Methods for Estimating the Depth of Decarburization of Steel Specimens," ASTM International, West Conshohocken, PA, 2005, DOI: 10.1520/E1077-01R05, www.astm.org.
- 9 J.F. ELLIOT, M. GLEISER, V. KAMAKRISHNA, Thermochemistry for Steelmaking, Addison-Wesley Publishing, 1963.
- 10 L. SUÁREZ et al., Development of an experimental device to study high temperature oxidation, Springer Science + Business Media (2008), 1 – 13.