

# MODELAMENTO COMPUTACIONAL DE UMA MATRIZ 3D DE AÇO INOXIDÁVEL DUPLEX E SEU LIMITE DE RESISTÊNCIA A TRAÇÃO EM FUNÇÃO DA EVOLUÇÃO DA FASE SIGMA \*

Ana Gabriella Conceição dos Santos<sup>1</sup>  
Harison da Silva Ventura<sup>1</sup>  
Mariana Sizenando Lyrio<sup>1</sup>  
Fernanda Nascimento Moreira<sup>1</sup>  
Gabriella Maria Silveira de Sá<sup>2</sup>  
Wesley Luiz da Silva Assis<sup>3</sup>

## Resumo

O surgimento de fases intermetálicas em aços é matéria de grande interesse devido ao caráter nocivo que elas podem conferir às propriedades mecânicas do material. No presente trabalho, foi estudado o efeito do surgimento da fase sigma em um aço inoxidável duplex através de modelamento numérico-computacional. A microestrutura duplex foi obtida via simulação, sendo, então utilizada como matriz para a nucleação e crescimento da fase sigma, também via simulação. O método do Cone Causal foi utilizado para o desenvolvimento da microestrutura e os resultados foram comparados com a metodologia da cinética formal de JMAK para fins de validação do modelo. Os resultados da simulação permitem obter, através da Regra das Misturas, previsões sobre as propriedades mecânicas do material, no caso, o limite de resistência à tração, que foi comparado com os dados encontrados na literatura. Foi possível constatar o aumento do limite de resistência à tração para maiores frações volumétricas de sigma, o que traz como resultado a diminuição da ductilidade para o aço.

**Palavras-chave:** Fase Sigma; Simulação Computacional; Modelamento 3D; Propriedades Mecânicas.

## COMPUTATIONAL MODELING OF A 3D MATRIX OF DUPLEX STAINLESS STEEL AND ITS ULTIMATE STRENGTH IN FUNCTION OF THE SIGMA PHASE EVOLUTION

### Abstract

The appearance of intermetallic phases in steels is a matter of great interest due to the harmful character that they can confer to the mechanical properties of the material. In the present work, the effect of the appearance of the sigma phase for a duplex stainless steel through numerical-computational modeling was studied. The duplex microstructure was obtained by computational simulation, to be used as a matrix for the nucleation and growth of the sigma phase, also by simulation. The Causal Cone method was used for the development of the microstructure and the results were compared with the formal kinetic methodology of JMAK for model validation purposes. The results of the simulation allow obtaining, by the Mixing Rule, predictions about the mechanical properties of the material, in this case, the ultimate strength, which was compared with the data found in the literature. It was possible to verify the increase of the hardness for greater volumetric fractions of sigma, which results in the reduction of the ductility of the steel.

**Keywords:** Sigma Phase; Computational Simulation; 3D Modeling; Mechanical Properties.

- <sup>1</sup> Engenharia Metalúrgica, Mestrando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.
- <sup>2</sup> Engenharia Metalúrgica, Doutorando, estudante, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil.
- <sup>3</sup> Engenharia Metalúrgica, Doutor, professor, Universidade Federal Fluminense, Núcleo de Modelamento Microestrutural, UFF-EEIMVR, Sala C87, Volta Redonda, RJ, Brasil..

## 1 INTRODUÇÃO

Os fenômenos de nucleação e crescimento vem há muito tempo sendo estudados, obtendo grande avanço através dos trabalhos de JMAK (Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov), que introduziram as bases da cinética formal de transformação [1-5].

A teoria de JMAK considera como premissa, que os núcleos estejam aleatoriamente distribuídos no espaço, e que a taxa de crescimento seja a mesma em todas as direções.

Dentre as categorias de aços, os aços inoxidáveis duplex possuem ampla utilização, pelas suas características austeníticas e ferríticas aparecendo de maneira equilibrada. Porém, durante os processos de resfriamento e soldagem, fases intermetálicas podem surgir; como a fase sigma e a fase chi [6]. A fase sigma, particularmente, é de grande interesse devido a sua função deletéria para as propriedades mecânicas no aço [7].

Estudos experimentais demonstram que a fase sigma surge preferencialmente nos contornos de grão da ferrita, e precipita sobre a mesma [8], caracterizando assim, um fenômeno de nucleação e crescimento podendo, de acordo com determinadas limitações, ser modelada pela teoria de JMAK.

No presente trabalho, utiliza-se a teoria do Cone Causal para simular uma matriz tridimensional de um aço duplex, sendo posteriormente preenchida pela fase sigma, para diferentes quantidades de núcleos.

Através de representações gráficas, o modelo numérico pôde ser comparado com as equações analíticas, e analisou-se a influência da quantidade de núcleos para o desenvolvimento da microestrutura.

O modelo computacional foi desenvolvido com intuito de representar a nucleação e o crescimento da fase sigma dentro da matriz ferrita/austenita. O modelo proporciona o acompanhamento da evolução microestrutural de uma amostra computacional de aço inoxidável duplex e simultaneamente da evolução das propriedades mecânicas durante a simulação.

A quantificação da variação do limite de resistência à tração a partir do desenvolvimento da fase sigma foi calculada através da Regra das Misturas, onde uma propriedade qualquer em materiais multifásicos pode ser estimada a partir das características individuais de cada fase constituinte do mesmo.

O modelo pode ser utilizado para prever diferentes níveis de propriedades mecânicas do material em distintos estágios evolutivos de fase sigma. A partir dos resultados obtidos via simulação computacional observa-se que a fase sigma tem grande influência nas propriedades finais do material.

## 2 DESENVOLVIMENTO

### 2.1 Metodologia Computacional

Para o desenvolvimento da microestrutura, em todas as simulações, foi utilizada uma matriz de 3003 células, modelada através de um programa desenvolvido em linguagem Fortran 2003. Para o desenvolvimento da matriz duplex, foram selecionados 80 núcleos de ferrita, e 70 núcleos de austenita, que resultaram em uma porcentagem de 58,4% de ferrita e 41,6% de austenita. Essa microestrutura foi a matriz utilizada nas simulações posteriores, onde a fase sigma precipitou e cresceu.

Avaliou-se a nucleação e crescimento da fase sigma para quatro valores iniciais de núcleos: 1000, 1500, 2000 e 2500 núcleos.

Através dos parâmetros do programa, é possível obter a fração volumétrica das fases, o tempo médio de reação, e a relação entre o aumento da fase sigma e as propriedades mecânicas do material.

As microestruturas obtidas foram visualizadas através do software Tecplot 360.

## 2.2 O modelo JMAK

O modelo de cinética formal proposto por JMAK é amplamente utilizado para modelar fenômenos de nucleação e crescimento em materiais no estado sólido. A equação geral, que considera núcleos aleatoriamente distribuídos no espaço, crescimento isotrópico, e grãos com formatos similares entre si, é definida a seguir:

$$V_V(t) = 1 - \exp(-kt^n) \quad (1)$$

Onde  $V_V$  é a fração volumétrica transformada,  $k$  é um conjunto de outras constantes de características geométricas, topológicas e dinâmicas, e  $n$  é a constante de Avrami.

Considerando nucleação por saturação de sítios, grãos com formato esférico e uma taxa de crescimento,  $G$ , constante, a equação (1) é então reescrita como:

$$V_V(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3} N_V G^3 t^3\right) \quad (2)$$

De acordo com a literatura [], a formação da fase sigma acontece preferencialmente nos contornos de grão ferrita/ferrita e ferrita/austenita, e cresce somente para dentro da ferrita. Sendo assim, a fase sigma não ocupa toda a matriz, sendo a fração volumétrica inicial de ferrita o limitante para o seu crescimento por todo o aço.

Logo, a fração volumétrica total que a fase sigma pode alcançar, considerando toda a matriz, é:

$$V_{V\sigma}(t) = (1 - \exp(-\pi N_V G^2 t^2)) * V_{Vficial} \quad (3)$$

E, de forma similar, conforme a fração volumétrica de sigma aumenta, a fração de ferrita diminui, seguindo a equação 4:

$$V_{Vf}(t) = V_{Vficial} - V_{V\sigma}(t) \quad (4)$$

## 2.3 A Regra das Misturas

A regra da mistura para materiais metálicos no estado sólido é uma analogia a regra das misturas lineares utilizadas em soluções no estado líquido na área de química. Nessa metodologia a solução apresenta propriedades de acordo com os compostos que constituem a mistura. O peso de cada componente presente na solução contribui de maneira linearmente ponderada para as propriedades da mistura de acordo com sua fração mássica. Em ciência dos materiais e metalurgia física esta técnica é utilizada por analogia considerando-se as frações volumétricas de cada fase em uma mistura no estado sólido. A propriedade final do material é determinada pela contribuição de cada propriedade de cada fase presente [9,10]. Suas

respectivas frações volumétricas ditam o quanto cada fase vai influenciar na propriedade em análise. Esta é determinada regra das misturas linear e pode ser observada na Equação 5:

$$P = P_1 V_{V_1} + P_2 V_{V_2} \dots P_n V_{V_n} \quad (5)$$

Onde  $P$  é a propriedade da mistura que se deseja calcular,  $P_1 \dots P_n$  são os valores da propriedade de cada componente separadamente e  $V_{V_1} \dots V_{V_n}$  são os valores da fração volumétrica de cada componente da mistura.

Considerando um aço inoxidável duplex, constituído por frações volumétricas de ferrita, austenita e sigma, a Regra das Misturas pode ser reescrita como segue:

$$P_{D(t)} = P_a V_{v_a(t)} + P_\sigma V_{v_\sigma(t)} + P_f V_{v_f(t)} \quad (6)$$

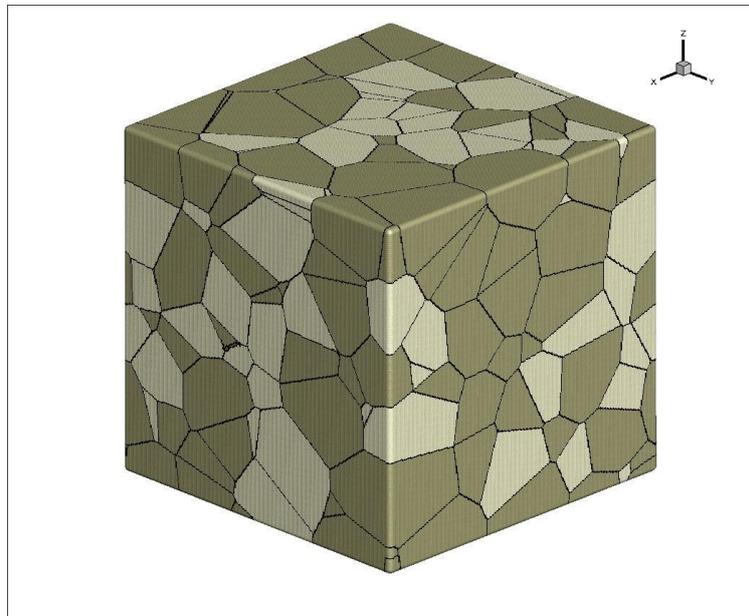
Onde  $P_{D(t)}$ , refere-se à propriedade final de interesse do aço duplex,  $P_a$ ,  $P_\sigma$  e  $P_f$  referem-se aos valores individuais de dada propriedade para austenita, sigma e ferrita, respectivamente, e suas frações volumétricas.

## 2.4 Resultados e Discussão

### 2.4.1 Desenvolvimento Microestrutural

As microestruturas obtidas como resultado das simulações são apresentadas a seguir.

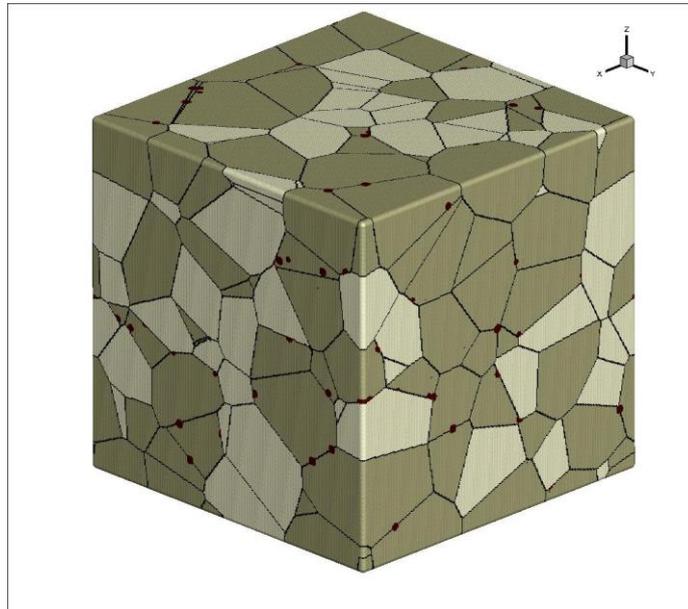
Na figura 1 tem-se a matriz duplex inicial, onde as posteriores simulações foram feitas. A fase ferrita é representada em tons de marrom escuro, e a fase austenita é representada pelos grãos em tons marrom claro.



**Figura 1.** Matriz Duplex inicial simulada

A nucleação da fase sigma é representada na Figura 2 onde se tem uma microestrutura com 1% de fase sigma, e onde pode-se perceber a nucleação nos

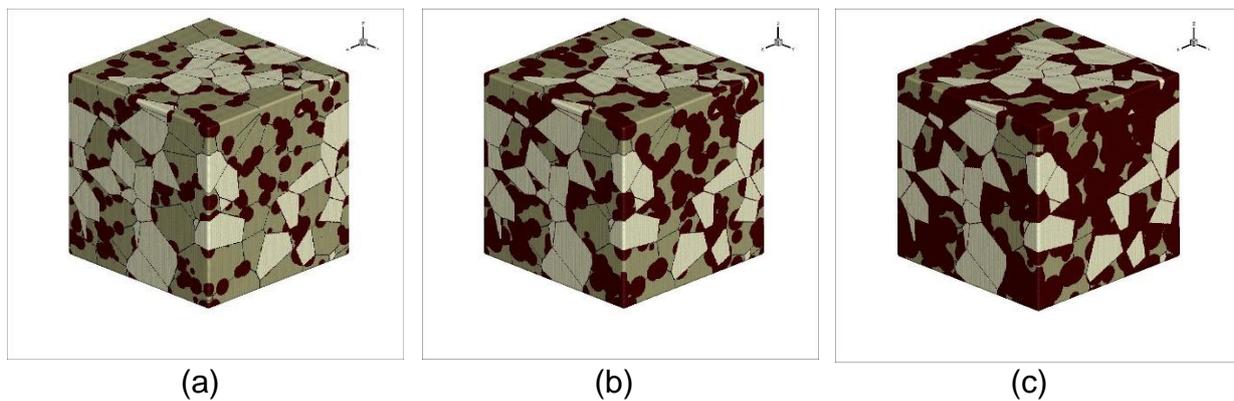
contornos de grão de ferrita/ferrita, e ferrita/austenita, como encontrado na literatura [11].



**Figura 2.** Matriz com início de nucleação da fase sigma 1% transformada

As figuras 3 e 4 representam o avanço das microestruturas para 1000 e 2500 núcleos iniciais de sigma. Percebe-se a concentração de núcleos nos contornos de grão ferríticos conforme o número inicial dos mesmos aumenta.

Para cada imagem (a), (b) e (c), as porcentagens de fração volumétrica transformada são de aproximadamente 25%, 50% e 75% de transformação, respectivamente.



**Figura 3.** Simulação computacional para 1000 núcleos

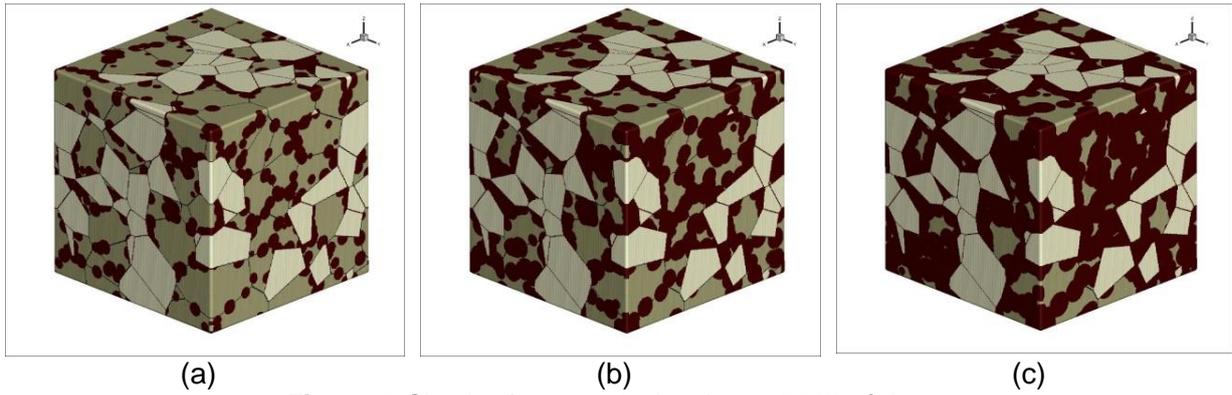


Figura 4. Simulação computacional para 2500 núcleos

### 2.4.2 Método analítico vs. Simulação

Além da representação em 3D, os gráficos de fração volumétrica são apresentados, onde pode-se avaliar a correlação entre a simulação e o modelo analítico.

O gráfico a seguir demonstra os resultados obtidos através da simulação para 1000 núcleos comparando o modelo analítico com a simulação.

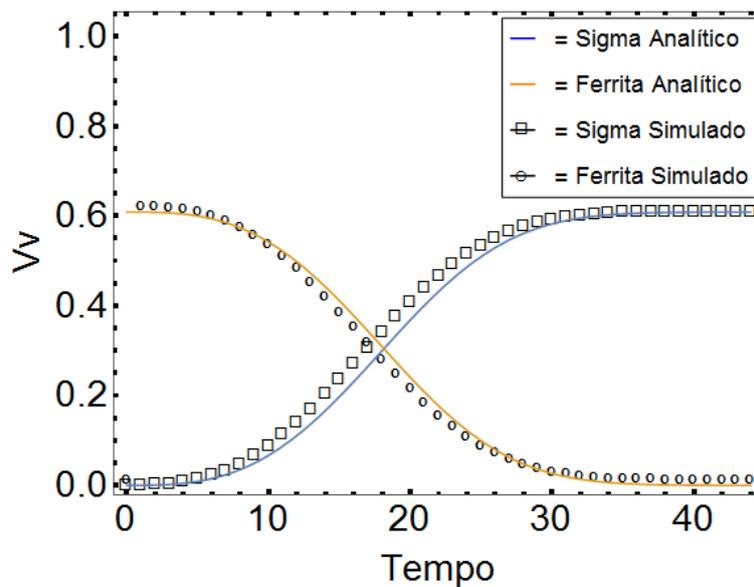
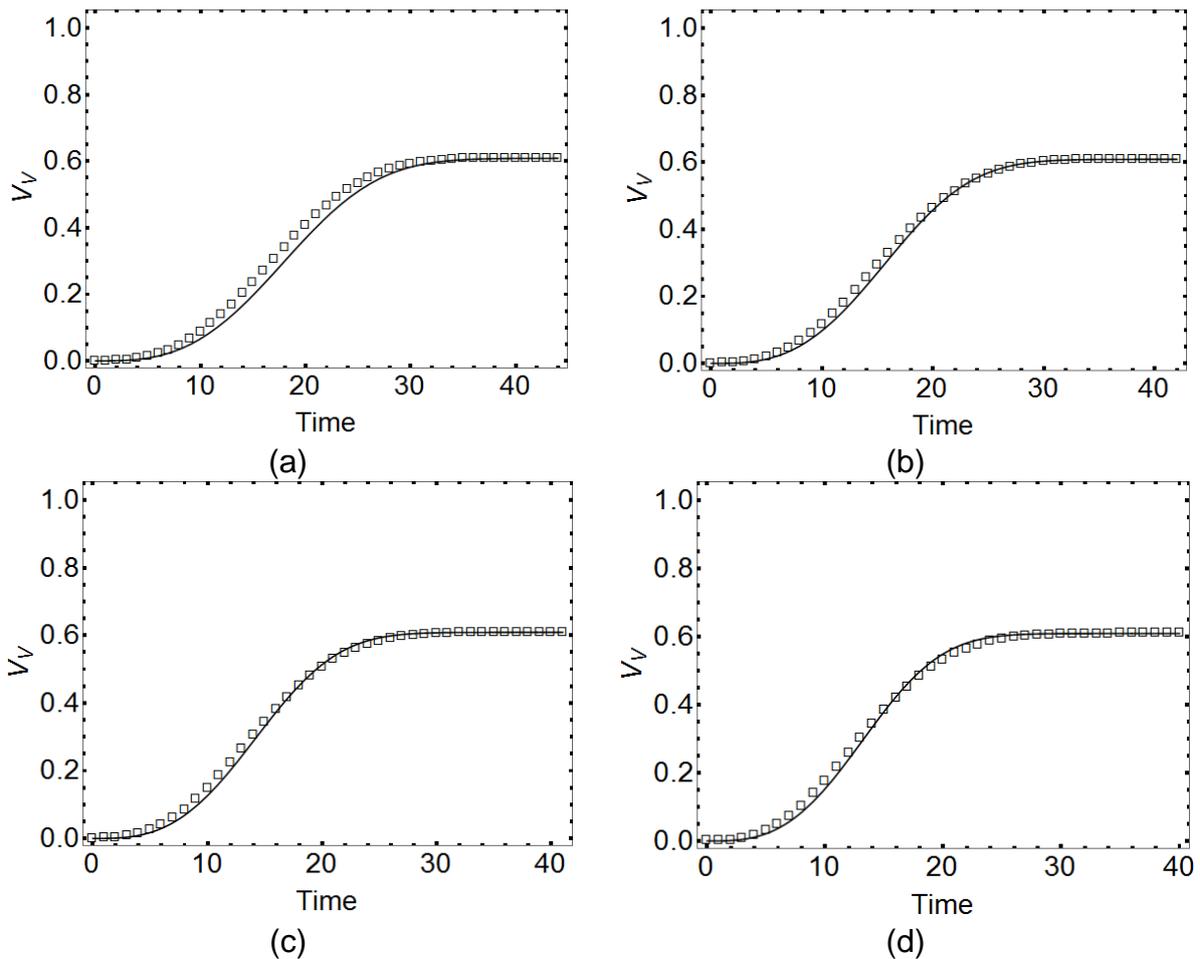


Figura 5. Simulação computacional da fração volumétrica de ferrita e sigma no tempo

Nota-se uma boa correlação entre os valores de fração volumétrica simulados e a equação analítica.

Como o modelo computacional contabiliza também os contornos de grão no cálculo da fração volumétrica transformada, há uma pequena variação entre o valor de fração volumétrica inicial de ferrita e a fração volumétrica final de sigma.



**Figura 6.** Fração volumétrica analítica e simulada de fase sigma para (a)1000 núcleos, (b)1500 núcleos, (c)2000 núcleos e (d)2500 núcleos

Na figura 6, pode-se observar a fração volumétrica para diferentes configurações de núcleos iniciais, onde se percebe que, conforme o número de núcleos aumenta, mais próximo da equação analítica fica o modelo.

### 2.4.3 Predição do limite de resistência à tração via Regra das Misturas

Através da determinação das frações volumétricas geradas pela simulação, é possível prever propriedades mecânicas do material.

Segundo dados obtidos da literatura [12] foi possível encontrar valores para os limites de resistência à tração para cada fase do aço inoxidável duplex 2205, através da solução de um sistema linear de equações.

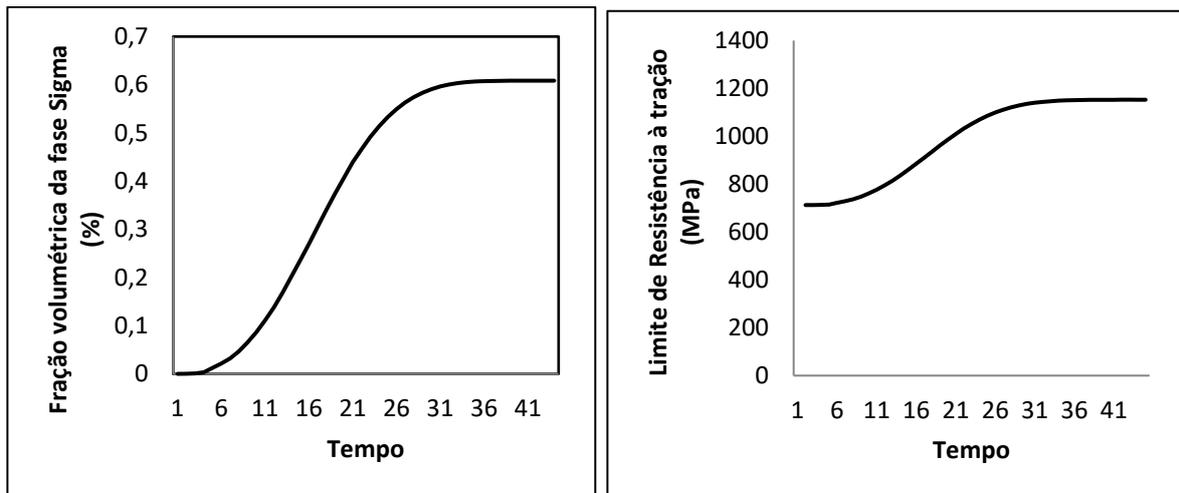
Os valores calculados com base nos dados de [12] e a lei das misturas são apresentados na tabela 1:

**Tabela 1.** Limite de resistência à tração para as fases constituintes do aço duplex 2205

LRT (Mpa)	Ferrita	Austenita	Sigma
	739,85	670,6	1462,9

De posse desses dados, e dos dados de fração volumétrica disponibilizados pela simulação, o desenvolvimento do limite de resistência à tração durante o crescimento da fase sigma na microestrutura pôde ser calculado.

Os resultados se encontram na figura 7:



**Figura 7.** Comparação entre o aumento da fração volumétrica da fase sigma e o aumento no limite de resistência a tração via simulação

Nota-se claramente que o aumento da porcentagem de fase sigma, altera consideravelmente o limite de resistência à tração do aço em questão. Os resultados vão de encontro com os dados encontrados na literatura [12] que predizem que a fase sigma é bem mais dura e frágil em comparação a ferrita e a austenita.

### 3 CONCLUSÃO

Encontrou-se boa concordância entre o modelo de cinética formal e a simulação para núcleos aleatoriamente distribuídos no espaço. O aumento do número de núcleos demonstrou melhor proximidade ao modelo analítico. Para densidades de núcleos maiores, mais simulações devem ser feitas.

A simulação também permitiu encontrar a relação entre o aumento da fase sigma e o aumento da resistência à tração associadas ao material, através da Regra das Misturas, sendo, portanto, uma maneira interessante de avaliar as propriedades do material de maneira preditiva, de acordo com um cálculo relativamente simples e rápido.

### Agradecimentos

Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) - Código Financeiro 001. Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, CNPQ e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro, FAPERJ, pelo apoio financeiro.

### REFERÊNCIAS

- 1 W.A. Johnson, R.F. Mehl, Reaction Kinetics in Processes of Nucleation and Growth, Trans. Metall. Soc. A.I.M.E. 1939; (135): 416–441.
- 2 M. Avrami, Kinetics of Phase Change. I General Theory, J. Chem. Phys. 7. 1939; (1103). doi:10.1063/1.1750380.
- 3 M. Avrami, Kinetics of Phase Change. II Transformation-Time Relations for Random

- Distribution of Nuclei, J. Chem. Phys. 8. 1940; (212). doi:10.1063/1.1750631.
- 4 M. Avrami, Granulation, Phase Change, and Microstructure Kinetics of Phase Change. III, J. Chem. Phys. 9. 1941; (177). doi:10.1063/1.1750872.
  - 5 A.N. Kolmogorov, On the Statistical Theory of Metal Crystallization, Isvetiia Acad. Nauk. SSSR-Seriia Mat. 1, 1937; 335–359.
  - 6 N.L. Isern, H.L. Luque, I.L. Jiménez, M.V. Biezma. Identification of sigma and chi phases in duplex stainless steels. Materials Characterization. 2016; (112): 20-29. doi: 10.1016/j.matchar.2015.12.004
  - 7 K. M. Adhe, V. Kain, K. Madangopal, H. S. Gadiyar. Influence of sigma-phase formation on the localized corrosion behavior of a duplex stainless steel. Journal of Materials Engineering and Performance. 1996; (5): 500-506. doi: 10.1007/BF02648847
  - 8 G. S. Fonseca, et al. Sigma Phase in Superduplex Stainless Steel: Formation, Kinetics and Microstructural Path. Materials Research. 2017; (20)1: 249–255.
  - 9 E. M. Bortoleto. Modelamento numérico-computacional das transformações de fase nos tratamentos térmicos de aços. Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2010.
  - 10 B. Feng, et al. On the rule of mixtures for bimetal composites. Materials Science & Engineering A. 2017; (704): 173-180.
  - 11 N. Lopez, M. Cid, M. Puiggali. Influence of  $\sigma$ -phase on mechanical properties and corrosion resistance of duplex stainless steels. Corrosion Science. 1999; (41): 1615-1631.
  - 12 M. A. Martins, G. L. Faria, T. R. Oliveira. Influência de diferentes tratamentos térmicos de Recozimento nas frações de fases e nas propriedades Mecânicas do aço inoxidável duplex UNS S31803. Tecnologia em Metalurgia, Materiais e Mineração. 2018; (15): 458-464.