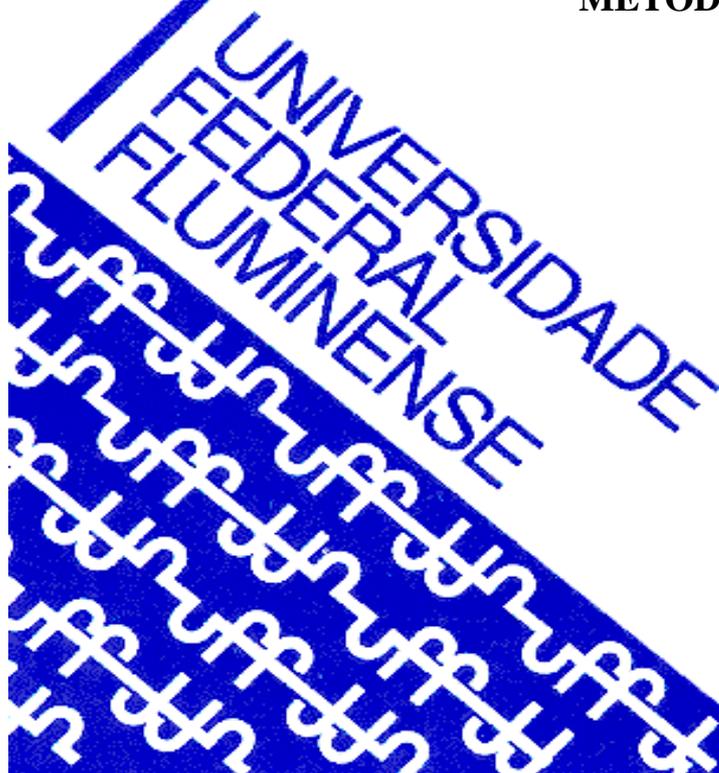




UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE
CENTRO TECNOLÓGICO
ESCOLA DE ENGENHARIA INDUSTRIAL METALÚRGICA DE VOLTA REDONDA
PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA METALÚRGICA

Dissertação de Mestrado

**VISÃO COMPUTACIONAL APLICADA AO
MODELAMENTO DE NUCLEAÇÃO,
CRESCIMENTO E PREDIÇÃO DE
PROPRIEDADES MECÂNICAS VIA
MÉTODO DO CONE CAUSAL**



**ALUNO:
FERNANDA NASCIMENTO
MOREIRA**

**ORIENTADOR:
PROF. D. SC. WESLEY LUIZ DA
SILVA ASSIS**

FERNANDA NASCIMENTO MOREIRA

VISÃO COMPUTACIONAL APLICADA AO MODELAMENTO DE
NUCLEAÇÃO, CRECIMENTO E PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES
MECÂNICAS VIA MÉTODO DO CONE CAUSAL

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do grau de mestre em Engenharia Metalúrgica e Materiais.

Área de concentração: Modelamento e Simulação de Processos e Fenômenos.

Orientador: **Wesley Luiz da Silva Assis, DSc.**

Volta Redonda

2019

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM
Gerada com informações fornecidas pelo autor

M835v Moreira, Fernanda Nascimento
 Visão computacional aplicada ao modelamento de nucleação,
 crescimento e predição de propriedades mecânicas via
 método do cone causal / Fernanda Nascimento Moreira ; Wesley
 Luiz da Silva Assis, orientador. Volta Redonda, 2019.
 81 f. : il.

 Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,
 Volta Redonda, 2019.

 DOI: <http://dx.doi.org/10.22409/PPGEM.2019.m.10718434781>

 1. Fase sigma. 2. Modelamento numérico. 3. Lei das
 misturas. 4. Produção intelectual. I. Assis, Wesley Luiz da
 Silva, orientador. II. Universidade Federal Fluminense. Escola
 de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda. III.
 Título.

CDD -

**VISÃO COMPUTACIONAL APLICADA AO MODELAMENTO DE
NUCLEAÇÃO, CRECIMENTO E PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES
MECÂNICAS VIA MÉTODO DO CONE CAUSAL**

Banca Examinadora:



DSc. Wesley Luiz da Silva Assis - Orientador
EEIMVR – UFF – Universidade Federal Fluminense



DSc. Gláucio Soares da Fonseca
EEIMVR – UFF – Universidade Federal Fluminense



DSc. Sérgio Roberto Montoro
FATEC / UniFOA

**Volta Redonda
2019**

*“Quando tudo parecer dar errado em sua vida, lembre-se que o avião decola
contra o vento, e não a favor dele.”*
(Henry Ford)

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus Pai pela fonte de energia que me mantém viva.

Agradeço ao meu marido, Thiago, pelo apoio e incentivo em todos os projetos que me proponho a planejar e executar.

Agradeço a minha filha, Maria Eduarda, por me dar motivos para sempre seguir e não desistir diante dos obstáculos.

Agradeço aos meus familiares e amigos por todo suporte e recurso oferecidos para que eu pudesse otimizar o tempo para execução da rotina da casa, compromisso com o trabalho e disciplina de estudo.

Agradeço ao meu orientador, Wesley, pela orientação de encontrar o caminho para atingimento dos objetivos desse trabalho.

Agradeço ao grupo de estudo constituído por mestres, doutores, estudantes de graduação, mestrado e doutorado do Núcleo de Modelamento Microestrutural da Escola de Engenharia Metalúrgica de Volta Redonda que demonstrou boa vontade esclarecer dúvidas e paciência para explicar o funcionamento de ferramentas essenciais para conclusão dessa dissertação.

RESUMO

A simulação computacional tem se tornado uma excelente ferramenta no apontamento da direção dos experimentos e previsão de comportamentos de materiais mediante alterações de parâmetros que simulam uma situação real. Nos últimos anos, temos observado muitos trabalhos de pesquisa, com ou sem experimentos, sobre a influência da formação da fase sigma nas propriedades mecânicas do aço inoxidável. Nesse trabalho, foi proposto o desenvolvimento de um modelo computacional para simular a nucleação e o crescimento da fase sigma em um aço inoxidável duplex SAF 2205 envelhecido à 800°C, bem como a evolução de propriedades mecânicas no material. A microestrutura inicial (domínio computacional) teve como ponto de partida uma micrografia capturada via microscopia ótica. Foram realizados tratamentos digitais nas imagens geradas para eliminação de ruídos e uma subsequente binarização com auxílio da biblioteca OpenCV. A partir da sintaxe da imagem digital, foi gerado um domínio discreto em 2D possibilitando a reconstrução numérica da imagem. O crescimento foi modelado para ocorrer somente sobre a fase ferrita. Durante a evolução microestrutural simulada foram calculadas as seguintes medidas estereológicas: fração volumétrica, comprimento da interface por unidade de área, caminho microestrutural, velocidade de avanço das interfaces. Além da técnica de visão computacional utilizada para modelar o domínio computacional, neste trabalho também foi apresentada outra inovação, que é a predição de propriedades mecânicas durante a evolução da microestrutura. O caráter preditivo de propriedades depende da composição em volume de cada fase presente na amostra. A propriedade foi calculada com o auxílio da regra linear das misturas. O modelo de construção da microestrutura foi validado a partir da própria microestrutura real obtida via microscopia ótica. O modelo de nucleação e crescimento foi validado pelo modelo analítico de JMAK, que tende a corroborar quando os dados de entrada atendem as limitações do modelo analítico. O modelo preditivo foi validado a partir de outros trabalhos obtidos na literatura. A partir dos resultados obtidos pode-se concluir que o modelo apresentou concordância com o previsto na literatura, tanto em termos de morfologia das fases presentes, quanto em termos de cinética de evolução da fase sigma

Palavras-chave: Fase sigma; Modelamento numérico; Lei das misturas

ABSTRACT

Computational simulation has become an excellent tool in pointing out the direction of experiments and predicting material behaviors through parameter changes that simulate a real situation. In recent years, we have observed many research papers, with or without experiments, about on the influence of sigma phase formation on the mechanical properties of stainless steel. In this study, it was performed the development of a computational model to simulate nucleation and growth of the sigma phase in a SAF 2205 duplex stainless steel aged at 800°C, as well as the evolution of mechanical properties in the material. The initial microstructure (computational domain) had as its starting point a micrograph captured via optical microscopy. The digital treatment of the images generated was performed for the elimination of noise and subsequent binarization with the support of the OpenCV library. From the syntax of the digital image, a discrete 2D domain was generated, providing a numerical reconstruction of the image. Growth has been modeled to occur only on the ferrite phase. During the simulated microstructural evolution, the following stereological measurements were calculated: volume fraction, interface length per unit area and microstructural path. In addition to the computational vision technique used to model the computational domain, in this work another innovation was also presented, which is the prediction of mechanical properties during the evolution of the microstructure. The predictive character of properties depends on the volume composition of each phase present in the sample. The property was calculated with the support of the linear rule of the mixtures. The microstructure construction model was validated from the actual microstructure obtained by optical microscopy itself. The nucleation and growth model was validated by the JMAK analytical model, which tends to corroborate when input data meet the limitations of the analytical model. The predictive model was validated from other papers obtained in the literature. From the results obtained, it can be concluded that the model presented agreement with what was provided in the literature, both in terms of morphology of the present phases, and in terms of kinetics of evolution of the sigma phase.

Keywords: Sigma phase; Numerical modeling; Law of mixtures

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Diagrama de fase Schaeffler–DeLong para aços inoxidáveis.....	23
Figura 2 Micrografia de um aço inoxidável duplex UNS S32750 evidenciando as fases ferrítica (escura) e austenítica (clara).	25
Figura 3 Diagrama Fe-Cr-Ni – aço inoxidável.....	27
Figura 4 Diagrama TTT esquemático, mostrando a cinética da precipitação das fases deletérias em um aço inoxidável duplex 2205	28
Figura 5 Fração volumétrica de ferrita e sigma com tratamento térmico de envelhecimento à 700°C.....	30
Figura 6 Fração volumétrica de ferrita e sigma com tratamento térmico de envelhecimento à 800°C.....	30
Figura 7 Fração volumétrica de ferrita e sigma com tratamento térmico de envelhecimento à 900°C.....	31
Figura 8 Dureza Vickers a 700°C ,750°C e 800°C.	31
Figura 9 Influência da precipitação da fase sigma na resistência a tração do aço duplex.....	32
Figura 10 Representação em 3D do Cone Causal.	39
Figura 11 Teoria do cone causal representada em 2D: (a) Tempo igual a 1, (b) Tempo igual a 2, (c) Tempo igual a 3, onde ocorre a transformação da célula que é o ponto centro da circunferência.	40
Figura 12 Diagrama esquemático do passo a passo das ferramentas e técnicas utilizadas para obtenção dos resultados.....	43
Figura 13 Amostra inicial obtida da barra de aço inoxidável duplex SAF 2205 cortada na dimensão de 38,10 mm de diâmetro x 14 mm de espessura.....	45
Figura 14 Amostra cortada do aço inoxidável duplex SAF 2205 utilizada para o tratamento térmico de envelhecimento.....	45
Figura 15 Micrografia do material estudado aço inoxidável duplex SAF 2205 como recebido. Parte bege representa a fase ferrita e parte branca, austenita.	48
Figura 16 Tela do software Image-Pro Plus com a quantificação das fases a partir da micrografia real do aço 2205 envelhecido à 800°C.....	49
Figura 17 (a) Micrografia real do aço duplex 2205 (b) Micrografia do aço duplex binarizada.	51

Figura 18 Imagem da microestrutura utilizada na simulação computacional com os contornos de grãos identificados a partir da imagem digital binarizada.	52
Figura 19 Microestrutura da amostra envelhecida por 60 minutos. Formação da fase intermetálica (marrom) nos contornos de ferrita (bege) e ilhas de austenita (branca).	55
Figura 20 Microestrutura da amostra envelhecida por 90 minutos.	56
Figura 21. Microestrutura da amostra envelhecida por 240 minutos	56
Figura 22 Microestrutura da amostra envelhecida por 540 minutos.	57
Figura 23 Comparativo dos resultados da fração volumétrica da fase sigma em função do tempo obtidos na simulação e modelo analítico para 300 núcleos.	61
Figura 24 Comparativo dos resultados de fração volumétrica de ferrita e sigma com a evolução do tempo obtidos via simulação e os analíticos.	61
Figura 25 Comparativo dos resultados da área superficial média em função do tempo obtidos na simulação e modelo analítico para 300 núcleos.	62
Figura 26 Caminho microestrutural - Simulação versus modelo analítico para 300 núcleos em função do tempo.	63
Figura 27 Comparação dos resultados de fração volumétrica (a) e área superficial (b) da fase sigma simulados x analítico com a variação de número de núcleos em função do tempo.	63
Figura 28 Caminho microestrutural - Simulação versus modelo analítico para 600, 1200, 2400 e 6000 núcleos em função do tempo.	64
Figura 29 Micrografias geradas a cada 10% da formação da fase sigma para simulação com 300 núcleos.	66
Figura 30 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 600 núcleos.	67
Figura 31 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 1200 núcleos.	68
Figura 32 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 2400 núcleos.	69
Figura 33 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 6000 núcleos.	70
Figura 34 (a) Micrografia real da amostra envelhecida por 90 min e (b) Micrografia virtual com 6000 núcleos obtida em 12% da evolução da fase sigma.	71
Figura 35 (a) Micrografia real da amostra envelhecida por 240 min e (b) Micrografia virtual obtida em 21% da evolução da fase sigma.	72

Figura 36 (a) Micrografia real da amostra envelhecida por 540 min e (b) Micrografia virtual obtida em 39% da evolução da fase sigma.	72
Figura 37 Evolução da propriedade mecânica do aço duplex SAF 2205 com a formação da fase sigma.	73

LISTA DE TABELA

Tabela 1 Tempos de tratamento isotérmico de envelhecimento de cada amostra e tempo total considerando encharque em 18 min.	47
Tabela 2 Fração volumétrica média das fases e desvio padrão das amostras.....	58
Tabela 3 Parâmetros de entrada para modelamento numérico.....	60
Tabela 4 Limite de resistência a tração e fração volumétrica inicial.....	73

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 Composição Química (% em peso) dos principais aços inoxidáveis.	26
Quadro 2 Adaptação dos detalhes de algumas das várias fases e precipitados de aços inoxidáveis.	27
Quadro 3 Composição química (% em peso) do aço inoxidável duplex UNS S31803.	29
Quadro 4 Valores da constante n variando de acordo com a dimensão do sistema e com o tipo de nucleação.	36
Quadro 5 Comparação entre as propriedades mecânicas dos aços inoxidáveis de microestrutura dúplex com ligas austeníticas.	41
Quadro 6 Composição química do aço inoxidável duplex (% em peso).	44
Quadro 7 Propriedades mecânicas do material estudado.	44

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

AISI	<i>American Iron and Steel Institute</i>
SAF	<i>Sandvik Austenite Ferrite</i>
UNS	Unified Numbering System
NMM	Núcleo de Modelamento Microestrutural
CCC	Cúbica de corpo centrado
CFC	Cúbica de face centrada
TCC	Tetragonal de corpo centrado
HV	Dureza Vickers
JMAK	Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov
KOH	Hidróxido de potássio
$M_{23}C_6$	Carboneto
MnS	Sulfeto de manganês
MO	Microscópio Óptico
n	Constante de Avrami que Indica o Tipo de Nucleação
V_E	Volume Estendido
V_v	Fração Volumétrica Transformada
G	Velocidade de Crescimento
N_v	Número de Núcleos por Unidade de Volume
S_v	Área Superficial Entre Material Transformado e Não Transformado por Unidade de Volume
N_A	Número de Núcleos por unidade de área
V_A	Fração Volumétrica Transformada por unidade de área
S	Desvio Padrão
t	Tempo de Tratamento Térmico
T	Temperatura
TTT	Diagrama Transformação-Tempo-Temperatura
α	Ferrita
χ	Fase Chi
γ	Austenita
γ_2	Austenita secundária
σ	Fase sigma

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	OBJETIVOS GERAL E ESPECÍFICO	19
2.1	OBJETIVO GERAL.....	19
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	19
3	MOTIVAÇÃO, JUSTIFICATIVA E VIABILIDADE	20
3.1	MOTIVAÇÃO	20
3.2	JUSTIFICATIVA.....	20
4	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
4.1	AÇOS INOXIDÁVEIS.....	21
4.1.1	<i>Breve histórico</i>	21
4.1.2	<i>Classificação</i>	22
4.1.3	<i>Aços Duplex</i>	24
4.1.4	<i>Fases Intermetálicas</i>	27
4.1.5	<i>Fase sigma</i>	29
4.2	TRANSFORMAÇÃO DE FASE.....	32
4.2.1	<i>Nucleação</i>	33
4.2.2	<i>Crescimento</i>	34
4.3	ESTEREOLOGIA QUANTITATIVA	34
4.4	CINÉTICA FORMAL	36
4.5	VISÃO COMPUTACIONAL.....	38
4.5.1	<i>Método do cone causal</i>	39
4.6	PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS AÇOS INOXIDÁVEIS	41
4.7	REGRA DA MISTURA	42
5	METODOLOGIA.....	43
5.1	MATERIAL	44
5.2	MÉTODOS	45
5.2.1	<i>Experimento</i>	45
5.2.1.1	<i>Tratamento térmico de envelhecimento</i>	46
5.2.1.2	<i>Preparação Metalográfica</i>	47
5.2.1.3	<i>Microscopia óptica</i>	47
5.2.1.4	<i>Quantificação das fases</i>	48
5.2.2	<i>Processamento das imagens</i>	50
5.2.3	<i>Modelo computacional</i>	52
5.2.3.1	<i>Detecção dos contornos de grãos</i>	52
5.2.3.2	<i>Simulação computacional</i>	53
5.2.4	<i>Obtenção da propriedade mecânica à 800°C</i>	54
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES	55
6.1	CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL.....	55
6.2	QUANTIFICAÇÃO DAS FASES	57
6.3	QUANTIFICAÇÃO DAS FASES VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	58
6.4	VALIDAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL.....	58
6.4.1	EQUAÇÕES ANALÍTICAS	58
6.4.2	PARÂMETROS DE ENTRADA.....	60
6.4.3	FRAÇÃO VOLUMÉTRICA DA FASE SIGMA PARA SIMULAÇÃO COM 300 NÚCLEOS	60
6.4.4	COMPRIMENTO DAS INTERFACES POR UNIDADE DE ÁREA PARA SIMULAÇÃO COM 300 NÚCLEOS.....	62
6.4.5	CAMINHO MICROESTRUTURAL PARA SIMULAÇÃO COM 300 NÚCLEOS.....	62

6.4.6	FRAÇÃO VOLUMÉTRICA PARA SIMULAÇÃO COM 600, 1200, 2400 E 6000 NÚCLEOS	63
6.4.7	CAMINHO MICROESTRUTURAL PARA SIMULAÇÃO COM 600, 1200, 2400 E 6000 NÚCLEOS	64
6.5	MICROGRAFIAS VIRTUAIS	65
6.5.1	MICROGRAFIAS VIRTUAIS PARA SIMULAÇÃO COM 300 NÚCLEOS	65
6.5.2	MICROGRAFIAS VIRTUAIS PARA SIMULAÇÃO COM 600 NÚCLEOS	67
6.5.3	MICROGRAFIAS VIRTUAIS PARA SIMULAÇÃO COM 1200 NÚCLEOS	68
6.5.4	MICROGRAFIAS VIRTUAIS PARA SIMULAÇÃO COM 2400 NÚCLEOS	69
6.5.5	MICROGRAFIAS VIRTUAIS PARA SIMULAÇÃO COM 6000 NÚCLEOS	70
6.5.6	MICROGRAFIAS REAIS X VIRTUAIS	71
6.6	PROPRIEDADES MECÂNICAS	73
7	CONCLUSÕES.....	75
8	SUGETÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	76
9	BIBLIOGRAFIA	77
10	APÊNDICE	81

1 INTRODUÇÃO

A busca constante por novos produtos que ofereçam baixo custo e boas propriedades mecânicas impulsiona as pesquisas de novos materiais. Assim, destacam-se os aços inoxidáveis, que são ligas de ferro-carbono enriquecidas com Cromo para aplicações que exijam boa resistência à corrosão, elevada tenacidade e ductilidade.

A classificação dos aços inoxidáveis leva em consideração a microestrutura presente no material, separados em cinco tipos: os austeníticos, ferríticos, martensíticos, endurecidos por precipitação e aços inoxidáveis duplex [1].

Os aços inoxidáveis duplex são constituídos por frações volumétricas de ferrita e austenita em proporções aproximadamente iguais, exibindo propriedades mecânicas e de resistência à corrosão superior aos outros aços [2] [3].

No entanto, são materiais que exigem cuidados especiais quando em utilização, sob o risco de comprometimento de suas propriedades. Quando expostos a altas temperaturas, por exemplo, há formação de fases intermetálicas que comprometem suas propriedades mecânicas. Dentre as fases intermetálicas formadas, a fase sigma é a principal responsável pela degradação de tais propriedades [4] [5]. Essa fase é extremamente dura e não magnética que, quando precipitada, fragiliza o material. A formação dessa fase é possível em aços duplex expostos a temperaturas entre 600 a 900°C e depende da composição química da liga.

Os aços inoxidáveis duplex têm sido objeto de vários estudos devido à diversidade de campos de atuação nos quais eles são empregados [6]. Eles têm uma utilização bem específica, principalmente em indústrias químicas, petrolíferas, geração de energia, papel e celulose [1].

O aço duplex SAF 2205, considerado neste trabalho, ocupa a maior parte do mercado de aços inoxidáveis duplex.

Neste contexto, esse estudo foi desenvolvido se utilizando de ferramentas de simulação computacional e técnicas de visão computacional baseadas em micrografias reais. Aplicando o método do Cone Causal no modelamento numérico de nucleação e crescimento de grãos da fase sigma e utilizando a regra linear das misturas foi possível prever as propriedades mecânicas do aço.

Essa dissertação apresenta no Capítulo 4 a revisão bibliográfica, na qual foi abordada um breve histórico, classificação e fases intermetálicas dos aços inoxidáveis, dando ênfase ao aço inoxidável duplex e formação da fase sigma. A literatura relacionada com a microestrutura

dos aços inoxidáveis duplex será apresentada nos tópicos sobre transformação de fases, estereologia quantitativa e cinética formal. Por fim, são apresentadas as principais propriedades mecânicas que caracterizam este tipo de aço e a lei linear das misturas.

No capítulo 5, aborda-se a metodologia utilizada para o desenvolvimento, obtenção de resultados e conclusão dessa dissertação.

Os resultados, apresentados no Capítulo 6, mostram o comparativo entre as simulações, variando-se o número de núcleos e o modelo analítico proposto por JMAK. As micrografias virtuais geradas foram comparadas às reais, obtidas após tratamento térmico de envelhecimento à 800°C de amostras do material (SAF 2205). Assim, foram gerados gráficos dos parâmetros estereológicos, tais como: fração volumétrica, área superficial e caminho microestrutural e das propriedades mecânicas em regime transiente. Por último, foram realizadas as conclusões mostrando a contribuição do estudo científico na previsão das propriedades mecânicas deste aço.

2 OBJETIVOS GERAL E ESPECÍFICO

2.1 OBJETIVO GERAL

Desenvolver um modelo computacional para simular a nucleação e o crescimento da fase sigma, bem como a evolução de propriedades mecânicas do aço em função do surgimento dessa fase. Este modelo aplica-se a um aço inoxidável duplex SAF 2205 envelhecido à 800°C por meio de uma microestrutura obtida via técnicas de simulação computacional a partir de uma micrografia real capturada por microscopia ótica.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Escolher micrografias de aço inoxidável duplex com um bom contraste entre as fases ferrita e austenita para gerar o domínio computacional;
- Binarizar e tratar as micrografias para gerar o domínio computacional utilizando-se a biblioteca OpenCV em um código escrito em C++;
- A partir das micrografias virtuais, modelar a nucleação em contornos de grãos ferríticos e o subsequente crescimento dentro da mesma;
- Variar alguns parâmetros microestruturais nas simulações tais como: número de núcleos por unidade de volume, local de nucleação e forma de nucleação;
- Determinar as frações volumétricas das fases ferrita, austenita e sigma em regime transiente via simulação computacional;
- Aplicar a regra das misturas para estimativa das propriedades mecânicas com a evolução da fase sigma via simulação computacional;
- Avaliar o efeito da formação da fase sigma sobre as propriedades mecânicas;
- Gerar microestruturas intermediárias para demonstrar a reação em regime transiente do modelo numérico;
- Comparar os resultados analíticos com os resultados numéricos;
- Comparar as microestruturas simuladas com as micrografias obtidas via microscopia em diferentes frações volumétricas de fase sigma.

3 MOTIVAÇÃO, JUSTIFICATIVA E VIABILIDADE

3.1 MOTIVAÇÃO

Os modelos analíticos podem não ser suficientes para responder todos os questionamentos no estudo ou desenvolvimento de projeto de novos materiais [7]. Este fato se deve a dificuldade de expressar toda a fenomenologia da natureza em termos de linguagem matemática. Não existe a “teoria de tudo” sobre qualquer assunto [7].

Apesar disso, os modelos são úteis para reduzir a quantidade de trabalho necessária na criação de novos materiais e simular comportamentos quando aplicados sob determinadas condições.

Assim, a simulação computacional tem se tornado uma excelente ferramenta no apontamento da direção dos experimentos e minimiza o custo com retrabalhos futuros após aplicação do material. Neste trabalho, em particular, tem-se também a grande motivação de unir a experimentação prática à metodologia analítica e numérica simultaneamente.

3.2 JUSTIFICATIVA

Uma justificativa para este trabalho, é a aplicação dos conhecimentos adquiridos no Núcleo de Modelamento Microestrutural (NMM) pertencente à Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda (EEIMVR) da Universidade Federal Fluminense (UFF) no desenvolvimento de uma nova ferramenta de simulação de nucleação e crescimento de grãos. Esta ferramenta agrega novas técnicas a outras já existentes no grupo de pesquisa do NMM. Estudos inéditos, tais como: desenvolvimento de domínio computacional a partir de micrografias reais e a incorporação de um primeiro modelo de predição de propriedades mecânicas em aços, proporcionando novos estudos e novas formas de caracterização de materiais metálicos via simulação computacional foram utilizados.

4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A revisão de literatura aborda inicialmente os principais aspectos dos aços inoxidáveis, dando ênfase ao aço inoxidável duplex, objeto de estudo deste trabalho. A literatura relacionada com a microestrutura dos aços inoxidáveis duplex é apresentada nos tópicos: transformação de fases e estereologia quantitativa. Por fim, são apresentadas as principais propriedades mecânicas que caracterizam este tipo de aço.

4.1 AÇOS INOXIDÁVEIS

4.1.1 Breve histórico

A aplicação de ligas metálicas resistentes à corrosão remonta ao ano de 1820 quando os ingleses Stoddard e Farraday observaram que ligas de ferro cromo eram mais resistentes ao ataque de certos ácidos. Estes cientistas não obtiveram sucesso na fabricação dessas ligas, pois não entenderam a importância do baixo teor de carbono [8].

Em 1822, outros cientistas ingleses conhecidos como Wood e Clark, desenvolveram uma liga resistente à corrosão de ferro-cromo-tungstênio, contendo 30 - 35% Cr e 2% de W. [8].

Em 1875, um cientista francês chamado Brustlein mostrou a importância do baixo teor de carbono em aços resistentes à corrosão, alegando que uma liga com alto teor de cromo deve ter uma concentração de carbono abaixo de 0,15% [8].

Outros estudos foram realizados após este período até o que a literatura considera como a descoberta dos aços inoxidáveis, que ocorreu em meados do século XX através do inglês Harry Brearley. Em 1912, foi solicitado a Harry, chefe de pesquisa da *Brown Firth Laboratories*, a pedido de fabricantes de armas que estudasse uma solução para evitar o desgaste no interior dos canos das armas de fogo que ocorreria devido ao calor liberado pelos gases [8].

O estudo do inglês consistiu em estudar uma liga de maior resistência à erosão. Para isso, realizou um ataque químico com ácido nítrico para revelar a microestrutura de novos aços com composição de 12,8% de Cr e 0,24% de C. Observou-se que o reagente não fazia nenhum efeito, concluiu assim que o cromo atuando como elemento de liga tinha o papel de evitar a corrosão. Sua descoberta na época permitiu a aplicação destes aços na indústria de talheres, que até naquele momento eram fabricados com aço-carbono que corroíam com facilidade devido aos

ácidos contidos nos alimentos, todavia não permitiu a solução do desgaste nas armas de fogo gerado pela erosão da superfície [8].

4.1.2 Classificação

O desenvolvimento dos aços inoxidáveis significou um grande avanço na fabricação de materiais resistentes à corrosão. Os aços inoxidáveis possuem como base os sistemas Fe-Cr e Fe-Cr-Ni com no mínimo 13% de cromo em solução sólida. Quando expostos à atmosfera com oxigênio, formam uma camada passiva de óxidos que impede o contato do metal base com a atmosfera agressiva [9].

Além do cromo, podem ser utilizados como elementos de liga o molibdênio, silício, nióbio, níquel e manganês [9].

O molibdênio tem a finalidade de aumentar a resistência à corrosão por via úmida.

O silício melhora a resistência à corrosão em alta temperatura.

O nióbio realiza o papel de elemento estabilizador, evitando a precipitação de cromo em forma de carbonetos durante o aquecimento ou o resfriamento.

O níquel, assim como o cromo, constitui um dos elementos primordiais dos aços inoxidáveis. É usado para estabilizar a austenita em temperatura ambiente.

Por sua vez, o manganês adicionado em pequenas quantidades associado ao níquel pode atuar como elemento endurecedor da fase sólida.

Adições de outros não-metals também são feitas, sendo as principais o Carbono e o Nitrogênio. A adição de carbono está relacionada com a elevação de dureza do material.

A participação de cada elemento de liga, adição de carbono e a manifestação da microestrutura predominante definem as classificações do aço inoxidável, sendo esta identificada no diagrama de fase Schaeffler–DeLong, representado na Figura 1.

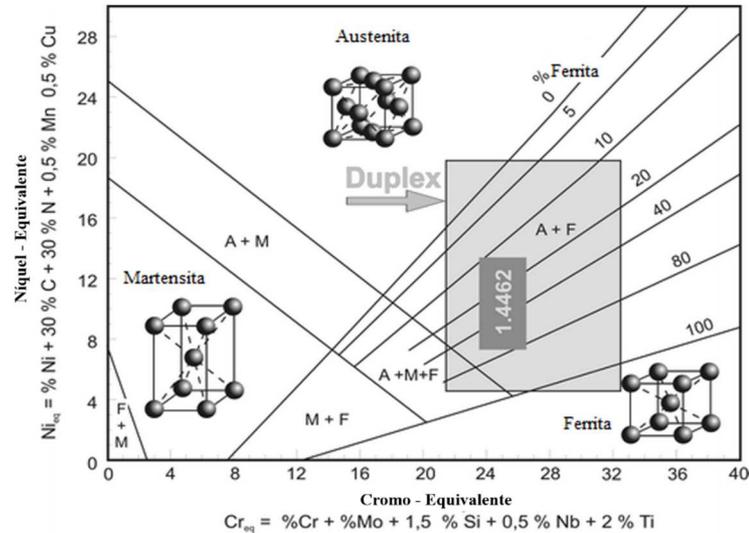


Figura 1 Diagrama de fase Schaeffler-DeLong para aços inoxidáveis.
Fonte: [10]

O método Schaeffler permite uma avaliação aproximada da microestrutura em função da composição do aço. Entretanto, esse método não leva em conta a influência da taxa de resfriamento e os tratamentos térmicos de envelhecimento [11].

Os aços inoxidáveis podem solidificar por vários mecanismos ou modos:

- ferrítico ou modo F ($L \rightarrow L+\alpha \rightarrow \alpha$);
- ferríticos - austeníticos ou modo FA ($L \rightarrow L+\alpha \rightarrow L+\alpha+\gamma \rightarrow \gamma+\alpha$);
- austenítico - ferríticos ou modo AF ($L \rightarrow L+\gamma \rightarrow L+\gamma+\alpha \rightarrow \gamma+\alpha$) e;
- austeníticos ou modo A ($L \rightarrow L+\gamma \rightarrow \gamma$).

A previsão do seu modo e da sequência de solidificação também pode ser avaliada previamente com sucesso usando as proporções de cromo e níquel equivalentes.

É definido como cromo e níquel equivalente, o conjunto de elementos que são estabilizadores ferríticos e austeníticos respectivamente, podendo ser calculado segundo as equações (1) e (2) [10].

$$Cr_{eq} = \%Cr + \%1,4Mo + 1,5\%Si + 0,5\%Nb + 2\%Ti \quad (1)$$

$$Ni_{eq} = \%Ni + 22\%C + 0,31\%Mn + 14,4\%N + \%Cu \quad (2)$$

As características dos aços inoxidáveis são descritas a seguir:

- Os aços inoxidáveis martensíticos são similares aos aços carbono apresentando uma estrutura cristalina tetragonal de corpo centrado (TCC). Tem como característica ser

endurecido por tratamento térmico e possuir natureza ferromagnética. O teor de cromo deste tipo de aço varia entre 11-18%.

- Os aços inoxidáveis ferríticos apresentam estrutura cristalina cúbica de corpo centrado (CCC). Eles têm o cromo como principal elemento de liga em concentração entre 10,5-30%. Os aços ferríticos não são endurecidos por tratamento térmico e no estado recozido tem o limite de escoamento entre 275 a 350 MPa. Apresenta limitações também em propriedades como a tenacidade, conformabilidade e soldabilidade em relação aos outros tipos de aços. Apresentam natureza ferromagnética [12] podendo ser utilizadas em válvulas solenóides.
- Os aços austeníticos apresentam estrutura cristalina cúbica de face centrada (CFC) e tem natureza não magnética. O teor de cromo está entre 16-26% e o teor de níquel até 35%. Os austeníticos possuem boa soldabilidade e tenacidade em baixas temperaturas. Tem desvantagem de possuir um elevado custo devido à alta concentração de níquel.
- Os aços endurecidos por precipitação oferecem alta resistência e razoável tenacidade com resistência à corrosão superior quando comparados aos martensíticos do sistema Fe-Cr-C. São divididos em três subclasses:
 - os austeníticos que apresentam tensão de escoamento de 600 a 700 MPa;
 - os martensíticos que apresentam tensão de escoamento de 1100 a 1600 MPa e;
 - os semi-austeníticos que apresentam tensão de escoamento entre 1200 a 1800MPa. São muito utilizados em aplicações aeroespaciais. [12].
- Aços inoxidáveis duplex como uma estrutura mista de ferrita e austenita em frações de volume aproximadamente iguais, combinam muitas das propriedades benéficas das duas fases. A ferrita fornece alta resistência mecânica e resistência à corrosão, enquanto que a austenita aumenta a ductilidade e a resistência à corrosão uniforme [13].

4.1.3 Aços Duplex

Os estudos relacionados ao aço duplex remontam ao ano de 1927, onde se pesquisou o efeito de frações volumétricas crescentes de ferrita na propriedade de aços inoxidáveis austeníticos. Observou-se que o aumento da concentração de ferrita aumentava o limite de escoamento desses materiais. É primordial a obtenção do balanço microestrutural de 50% austenita e 50% ferrita [14].

Na Figura 2, observa-se as quantidades de grãos aproximadamente iguais de ferrita (escura) e austenita (clara), sendo eles refinados e equiaxiais quando sofrido o tratamento térmico de normalização. Com isso, o aço apresenta propriedades mecânicas de ambas as fases.

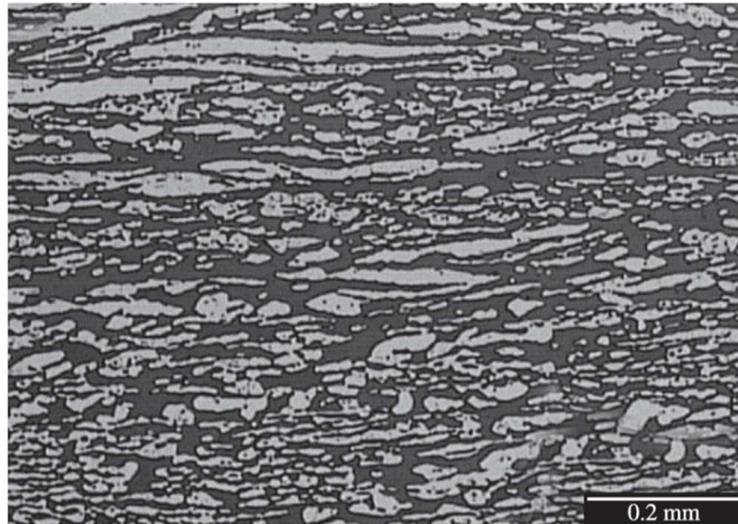


Figura 2 Micrografia de um aço inoxidável duplex UNS S32750 evidenciando as fases ferrítica (escura) e austenítica (clara).

Fonte: [15]

As duas fases são classificadas como inoxidáveis, pois contém mais de 13% em peso de cromo. Os elementos de liga mais importantes atuantes no aço duplex são: cromo, molibdênio, níquel, nitrogênio, cobre, silício e tungstênio. O cromo e o molibdênio atuam no sentido de formar e estabilizar a ferrita, por outro lado nitrogênio e níquel são estabilizadores da austenita.

Os aços duplex são amplamente utilizados em processos offshore de petróleo e gás, processamento químico, usinas de dessalinização, celulose e papel, esculturas em locais costeiros, fabricação de cerveja, processamento de alimentos, pontes, sistemas de tensionamento, reprocessamento nuclear, infraestrutura de túneis, navios-tanque de produtos químicos. [16] [17].

Os diferentes tipos de aços inoxidáveis duplex são separados em três grupos em relação à composição química [9]:

- Aço inoxidável duplex de baixa liga: sendo assim chamados por possuir baixa concentração de elementos de liga e serem considerados substitutos dos aços austeníticos como 304L/ 316L. Por exemplo tem-se: SAF 2304 (UNS S32304 / DIN 1.4362).

- Aços inoxidáveis duplex de média liga: nessa família, enquadram-se os duplex mais utilizados. A qualidade típica é o SAF 2205 (UNS S31803 / DIN 1.4462). Apresentam resistência à corrosão intermediária entre os austeníticos comuns 304L/ 316L e aços inoxidáveis superausteníticos com 5 e 6% de molibdênio.
- Aços inoxidáveis duplex de alta liga: comumente designados por superduplex. O SAF 2507 (UNS S32750 / DIN 1.4410) apresenta elevada resistência à corrosão comparável aos superausteníticos que possuem entre 5 e 6% de molibdênio.

A composição química dos principais aços inoxidáveis está representada no Quadro 1.

Quadro 1 Composição Química (% em peso) dos principais aços inoxidáveis.
Fonte: [18]

AISI/UNS	%C	%Si	%Mn	%Cr	%Ni	%Mo	%N	%Cu	Microestrutura
304 L	0,03	0,5	1,3	18,5	10	-	-	-	Austenita
316 L	0,03	0,4	1,7	17,5	13	2,6	-	-	Austenita
S 32304	0,03	0,5	1	23	4,5	-	0,1	-	Duplex
S 31803	0,03	1	2	22	5,5	3,2	0,18	-	Duplex
S 32750	0,03	0,8	1,2	25	7	4	0,3	-	Duplex

AISI – American Iron and Steel Institute

UNS – Unified Numbering System

O sistema ternário Fe-Cr-Ni representado na Figura 3, serve como base para os aços inoxidáveis. Este relaciona a microestrutura, a composição e a temperatura indicando a matriz predominante ou se há formação de uma liga bifásica. Para uma alta razão Cr/Ni, a ferrita delta pode ocorrer durante a solidificação e a fase sigma pode ocorrer durante o envelhecimento em temperaturas entre 550°C e 900°C [11].

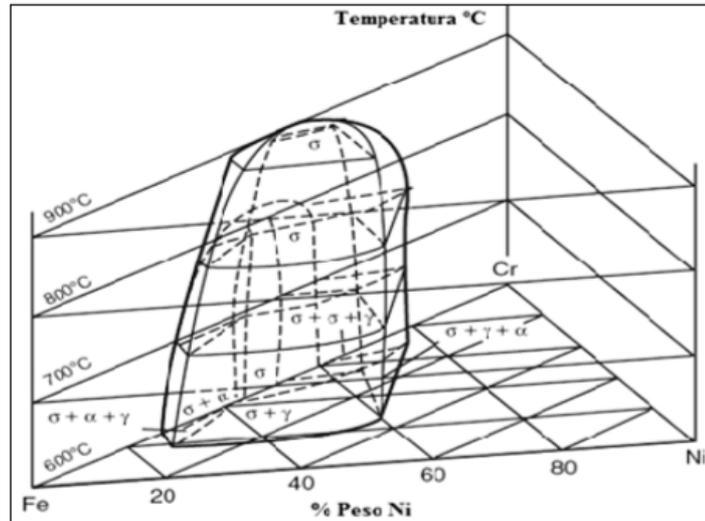


Figura 3 Diagrama Fe-Cr-Ni – aço inoxidável
Fonte: [11]

O intervalo composicional do campo da fase sigma aumenta, quando a temperatura está abaixo de 900°C [11].

4.1.4 Fases Intermetálicas

No aço inoxidável duplex, quando submetido a determinadas temperaturas, ocorre a formação de fases e precipitados. As fases mais encontradas estão listadas no Quadro 2.

Tanto a fase chi (χ) quanto a fase sigma (σ) são intermetálicas e se formam frequentemente em aços inoxidáveis após o envelhecimento térmico. Vários estudos, concluíram que, embora a fase chi se forme antes que a fase sigma, ela acaba se transformando em fase sigma quando submetido ao envelhecimento prolongado [6].

Quadro 2 Adaptação dos detalhes de algumas das várias fases e precipitados de aços inoxidáveis.
Fonte: [6]

Fase	Estrutura	Faixa de temperatura de formação (°C)
α	CCC	
σ	CCC	300-525
α'_{cr}	CFC	
γ	Tetragonal	600-1000
χ	CCC	700-900
Cr_2N		700-900
$M_{23}C_6$	CFC	600-950

A Figura 4, mostra um diagrama TTT (Transformação, temperatura e tempo) esquemático, caracterizando a faixa de temperatura e a cinética de precipitação de várias fases secundárias que podem precipitar nos aços inoxidáveis duplex entre 950 e 570 ° C, como as fases sigma, chi, $M_{23}C_6$ e Cr_2N .

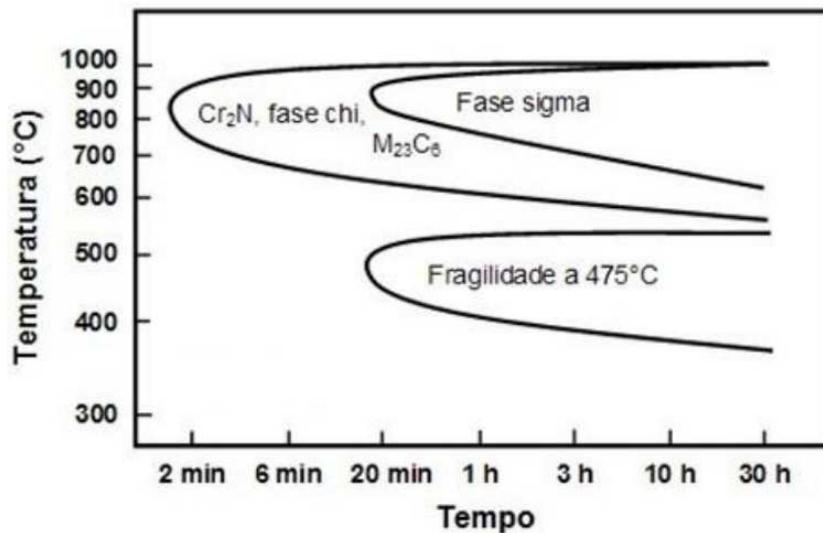


Figura 4 Diagrama TTT esquemático, mostrando a cinética da precipitação das fases deletérias em um aço inoxidável duplex 2205

Fonte: [19]

Por exemplo, a formação da fase sigma pode ocorrer pela decomposição eutetóide da fase de ferrita (ferrita → sigma + austenita secundária) e a velocidade máxima para a formação da fase sigma ocorre entre 800 e 850°C [19]. No entanto, a nucleação e crescimento de sigma a partir da fase de ferrita são bastante comuns e não há consenso sobre um único mecanismo para a formação da fase sigma [20], pois depende da morfologia.

Essas fases frágeis e estáveis são muito mais ricas em Cr que as fases de austenita e ferrita da microestrutura do aço duplex, causando depleção de Cr nas áreas adjacentes ao redor desses precipitados ricos em Cr, diminuindo localmente a resistência à corrosão da microestrutura e a tenacidade à fratura do componente.

Neste sentido, os usuários e produtores de peças de aço duplex devem estar bem conscientes de como a exposição térmica durante o processamento (soldagem e fundição) podem prejudicar as propriedades mecânicas, a corrosão e, conseqüentemente, a vida útil dos componentes [1].

No entanto, a formação da fase sigma, por exemplo, pode ser bem aproveitada como uma técnica para detectar pontos quentes em caldeiras de alta temperatura. Essa técnica é conhecida como Sigmaplug [21].

4.1.5 Fase sigma

Em altas temperaturas há formação de fases intermetálicas que comprometem as propriedades mecânicas das ligas de aço inoxidável. É comum que outras fases precipitadas nesses aços sejam desconsideradas na análise das propriedades do material, escolhendo a fase sigma como a principal responsável pela degradação de tais propriedades [4] e [5].

Cabe destacar a formação da fase sigma, extremamente dura e não magnética que quando precipitada fragiliza o material. A estrutura cristalina da fase sigma possui arranjo tetragonal de corpo centrado. A formação dessa fase é possível, por exemplo, em aços duplex e superduplex que trabalhem entre 600 a 900°C e depende da composição química da liga.

As principais propriedades mecânicas afetadas são a tenacidade e ductilidade. A resistência à corrosão do aço inoxidável também é afetada. Isto ocorre, pois há um empobrecimento do cromo e do molibdênio presentes ao redor da fase sigma formada na matriz.

A fase sigma é rica em elementos ferritizantes como o cromo, molibdênio e silício fazendo com que a formação preferencial se dê a partir da ferrita. A fase sigma pode se formar como produto da decomposição eutetóide da ferrita original, gerando austenita secundária, com disposição lamelar ou então divorciada. Esse comportamento depende tanto de temperatura quanto da composição química [22].

Para a composição química apresentada do Quadro 3 e uma fração volumétrica inicial de ferrita de 40,9%, a velocidade de formação da fase sigma pode variar em diferentes temperaturas.

Quadro 3 Composição química (% em peso) do aço inoxidável duplex UNS S31803.
Fonte:[22]

Cr	Ni	Mo	Mn	Si	N	C
22.2	5.70	2.98	1.60	0.44	0.160	0.016

A Figura 5, Figura 6 e Figura 7, representam essas diferenças, sendo que para as temperaturas entre 700°C e 800°C, a fase sigma se forma consumindo preferencialmente a ferrita, mas há consumo de austenita também (fração final de sigma superior à fração inicial de ferrita) para tempos muito longos.

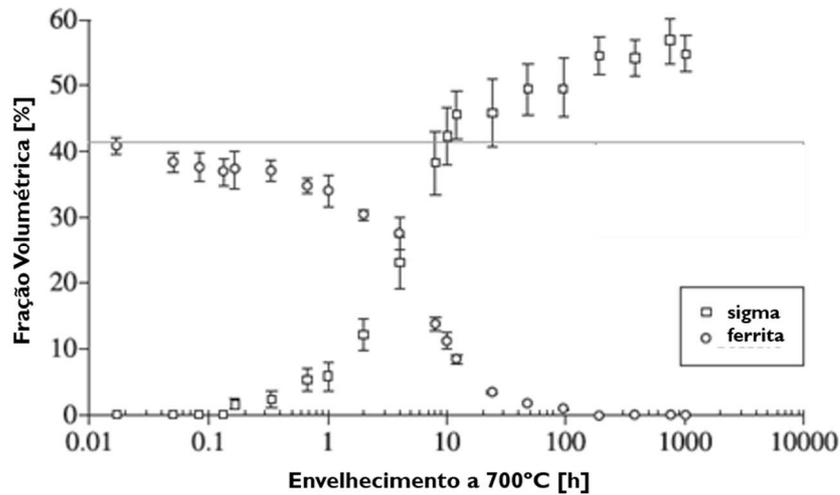


Figura 5 Fração volumétrica de ferrita e sigma com tratamento térmico de envelhecimento à 700°C.

Fonte: [22]

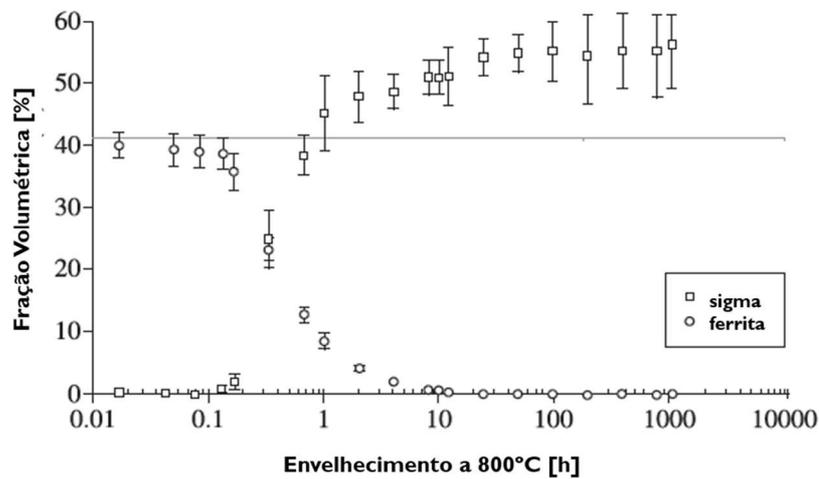


Figura 6 Fração volumétrica de ferrita e sigma com tratamento térmico de envelhecimento à 800°C.

Fonte: [22]

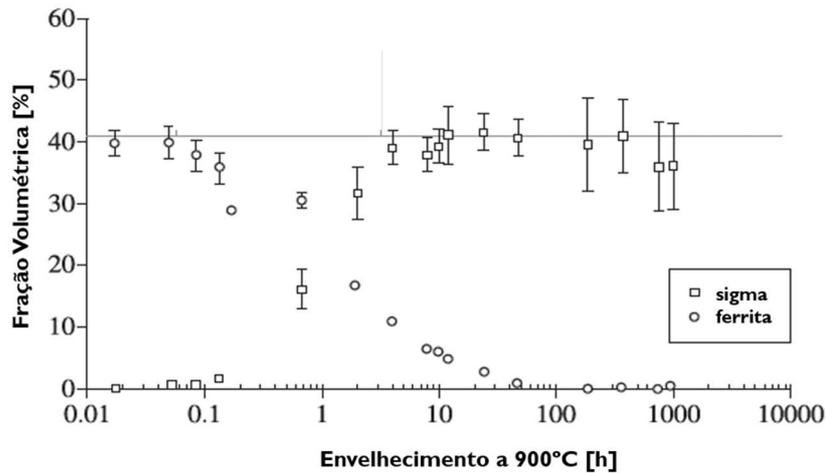


Figura 7 Fração volumétrica de ferrita e sigma com tratamento térmico de envelhecimento à 900°C.
Fonte: [22]

Observa-se que o resultado experimental à temperatura de 900°C, a fase sigma consome somente a ferrita.

A precipitação de fase sigma nos aços inoxidáveis pode ocorrer tanto nos tipos austeníticos, como nos ferríticos e nos ferríticos-austeníticos com microestrutura duplex. A precipitação deste intermetálico Fe-Cr ou Fe-Cr-Mo, de estrutura tetragonal, com 30 átomos por célula unitária, causa perda de tenacidade e empobrecimento da matriz em cromo e molibdênio.

O gráfico da Figura 8 apresenta a dureza Vickers do aço inoxidável superduplex (UNS S32750) nas temperaturas de envelhecimento a 700°C, 750°C e 800°C.

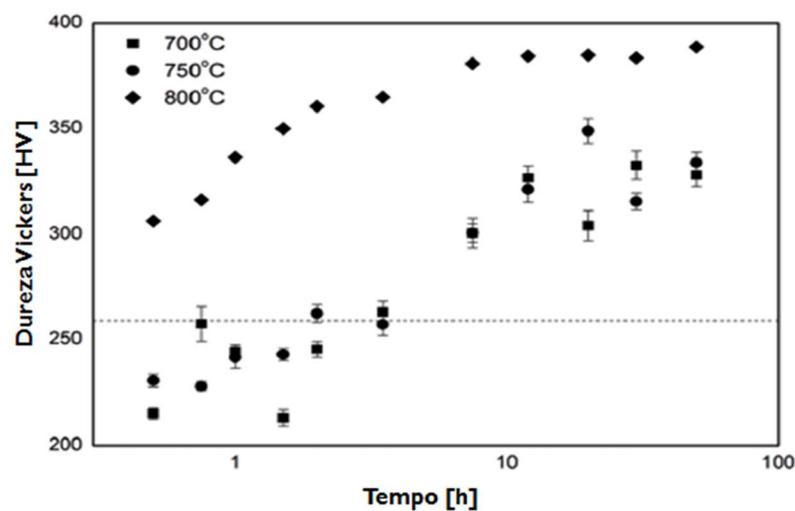


Figura 8 Dureza Vickers a 700°C, 750°C e 800°C.
Fonte: [23]

A adição de elementos de liga causam um comportamento complexo de transformação e precipitação dos aços duplex [24]. O efeito da formação da fase sigma, a principal fase intermetálica deletéria do aço inoxidável duplex, foi comprovado experimentalmente em trabalhos anteriores [23]

Nos gráficos da Figura 8 e da Figura 9 são mostrados, através de resultados obtidos experimentalmente, o efeito da formação da fase sigma nas propriedades mecânicas do material.

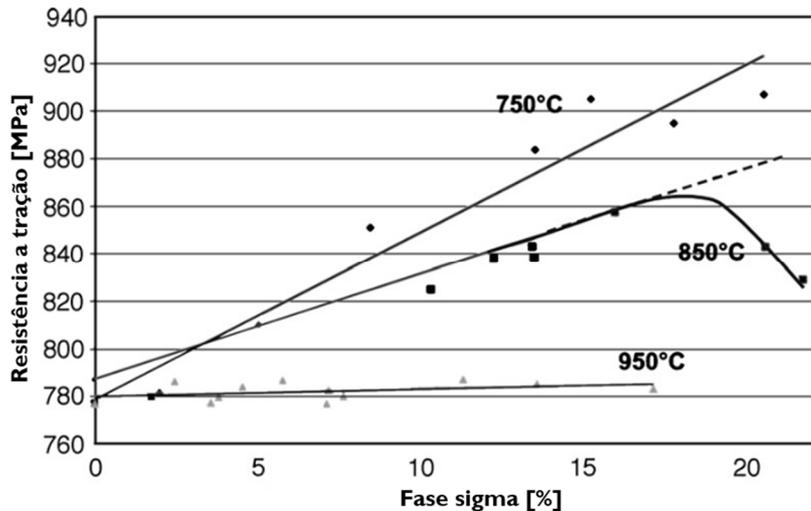


Figura 9 Influência da precipitação da fase sigma na resistência a tração do aço duplex.
Fonte: [24]

A variação da resistência à tração, observada no gráfico da Figura 9 dos aços inoxidáveis duplex quando expostos a temperaturas de 750°C e 850°C é mais definida e apresenta uma variação linear até determinada fração volumétrica obtida. Já a 950°C com fração volumétrica superior a 15%, o comportamento se mostra não identificável [24].

Nos aços austeníticos, a precipitação de sigma geralmente demanda centenas ou até milhares de horas e as frações volumétricas precipitadas não são altas [25].

4.2 TRANSFORMAÇÃO DE FASE

A versatilidade dos materiais metálicos com relação às suas propriedades se dá devido aos vários mecanismos que influenciam a sua microestrutura, principalmente os tratamentos térmicos e os processos de fabricação do material. Com estes mecanismos, ocorrem também as transformações de fases que é a formação de uma ou mais fases novas a partir de uma fase

original. Uma transformação de fase pode ou não depender de difusão atômica, contanto que a nova fase tenha composição química e/ou estrutura cristalina diferente do original.

As transformações de fase no estado sólido ocorrem na maioria dos casos de tal modo que uma fase denominada matriz transforma-se em outra fase produto.

Este fenômeno não ocorre de forma instantânea: para que haja a formação de uma nova fase é necessário haver uma ‘força’ que gere uma energia e facilite sua transformação, conhecida como energia de ativação.

A transformação de fases é normalmente dividida em duas etapas: a nucleação, onde os embriões se tornam núcleos quando estes atingem um raio crítico para sua formação. Estes núcleos ora formados crescem consumindo a fase matriz, tem-se neste caso a etapa chamada crescimento.

A condição de equilíbrio demonstrada em um diagrama de fase só é possível quando o resfriamento é dado em taxa extremamente lenta - o que para fins práticos é inviável. Um resfriamento fora do equilíbrio pode ocasionar transformações de fases em temperaturas diferentes das previstas no diagrama. O estudo de transformação de fases contempla o entendimento de como ocorre a alteração na microestrutura do material.

Uma microestrutura pode ser definida como a estrutura detalhada de um material, obtida através do microscópio. Cada microestrutura apresenta características particulares, tais como o tamanho, informações geométricas, distribuição de fases e morfologia. E, para entender o comportamento do material envolvido, é necessário estabelecer um vínculo entre a microestrutura e suas propriedades [26].

O surgimento de nova fase ocorre através da nucleação e seu posterior crescimento. A nucleação pode ocorrer de forma homogênea ou heterogênea. A primeira ocorre em uma região livre de defeitos, impurezas ou ausência de efeitos cristalográficos ou tensões. Por sua vez, a segunda ocorre na presença de cristalinos como contornos de grão e interfaces de precipitados. Na prática, a nucleação mais comum é a heterogênea [27].

4.2.1 Nucleação

Há dois tipos de nucleação: a homogênea e a heterogênea.

Na homogênea, a fase transformada é formada pelo material de forma igual e uniforme por toda a matriz.

Já na nucleação heterogênea, a nucleação ocorre em locais energeticamente preferenciais (substratos) na matriz como, por exemplo, em defeitos cristalinos (discordâncias, inclusões, contornos de grão, entre outros).

4.2.2 Crescimento

Quando o embrião se torna um núcleo estável, este está pronto para a etapa de crescimento da nova fase. Na etapa do crescimento, os núcleos estáveis crescem, consumindo a fase original até atingir o ponto de equilíbrio, que normalmente em um material monofásico é o consumo total da antiga fase.

O principal mecanismo nessa etapa da transformação de fase é a difusão, com isso, a taxa de crescimento (G) é calculada a partir desta, em função da temperatura (T), de acordo com a equação (3) de Arrhenius (1859-1927) [28]:

$$\dot{G} = C e^{\frac{-Q}{RT}} \quad (3)$$

Onde, C é uma constante, Q é a energia de ativação, R é a constante dos gases e T é a temperatura absoluta.

Por fim, com a taxa de nucleação e a taxa de crescimento, é possível prever a temperatura em que uma fase possa se transformar rapidamente através da taxa de transformação global. Como essa taxa é inversamente proporcional ao tempo de transformação, é possível inverter a curva em relação ao tempo para poder prever o início da transformação de fase conhecida como curva TTT, a curva mais amplamente usada para determinar a cinética da transformação de fase.

4.3 ESTEREOLOGIA QUANTITATIVA

A estereologia pode ser definida como um conjunto de procedimentos baseados em geometria e probabilidade que, a partir de medições ou contagem de elementos estereológicos de uma imagem plana de uma estrutura tridimensional, produz informações sobre características da estrutura original. As características estruturais que podem ser determinadas

pela estereologia são: volumes de certos elementos estruturais (o que pode representar a determinação de composição de materiais ou frações de fases presentes), áreas de elementos superficiais planos ou não, comprimentos de elementos lineares, nível de vizinhança entre fases presentes em uma estrutura (denominada contiguidade) e tamanhos de elementos volumétricos (grãos), entre outras [27].

É necessário conhecer o comportamento dos materiais para definição de sua aplicação através do entendimento da estrutura, composição, quantidade, tamanho, morfologia, relações de orientação e distribuição das fases, quantidade e distribuição dos defeitos cristalinos. Esses conhecimentos são de extrema valia para o entendimento e, às vezes, até para a previsão de numerosas propriedades dos materiais [27].

Ao realizar uma análise metalográfica de forma quantitativa é necessário compreender como se dá a formação de novas fases. A formação de uma nova fase ocorre principalmente em contornos de grão, que é um tipo de defeito interfacial que ocorre em cristais que possuem diferentes orientações cristalográficas. O crescimento do contorno de grão é o processo pelo qual o tamanho médio de grão aumenta continuamente durante o tratamento térmico. Quando ocorre o crescimento de grão a área de contornos de grão diminui, então, reduz a energia de superfície.

A principal medida da estereologia é a fração volumétrica que pode ser realizada em uma abordagem de fração de pontos, fração de área ou até mesmo fração linear. Esta igualdade está representada na equação (4), onde V_v representa fração volumétrica, fração de área (A_A), fração linear (L_L) e fração de pontos (P_P) [27].

$$V_v = A_A = L_L = P_P \quad (4)$$

A forma mais simples de encontrar a fração volumétrica é através da fração de pontos que consiste em dispor uma rede de pontos sobre determinada área da microestrutura e contar quantos pontos que interceptam determinada fase na malha total considerada. A quantidade das fases presentes em uma microestrutura é geralmente dada pelas suas frações volumétricas.

4.4 CINÉTICA FORMAL

Um dos modelos mais utilizados para o modelamento das reações por nucleação e crescimento, foi desenvolvido nos anos 30, pelos trabalhos de Johnson e Mehl [29] , Kolmogorov [30] e Avrami [31][32][33] , conhecido também por modelo JMAK. A teoria de JMAK, com o objetivo de modelar a nucleação e crescimento dos grãos recristalizados, ainda muito utilizada nos dias atuais. O modelo JMAK considerou, inicialmente, o crescimento de apenas uma fase, partindo do princípio que os grãos crescem sem interferências de seus vizinhos. Assim, a transformação ocorre com os grãos crescendo uns para dentro dos outros (volume estendido), infinitamente.

A equação (5) é frequentemente denominada equação generalizada de JMAK ou equação de Avrami, onde V_v é a fração recristalizada, k é conjunto de outras constantes de características geométricas, topológicas e dinâmicas, n representa a constante de Avrami [32], conforme demonstrado Quadro 4, e t é o tempo de reação.

$$V_v = 1 - \exp(-kt^n) \quad (5)$$

Quadro 4 Valores da constante n variando de acordo com a dimensão do sistema e com o tipo de nucleação.

Fonte:[34]

Dimensão	Saturação de sítios	Nucleação constante
3D	$n=3$	$n=4$
2D	$n=2$	$n=3$
1D	$n=1$	$n=2$

No estudo do modelo inicial da teoria JMAK, considera-se a transformação de uma fase "mãe" em uma nova fase, por meio de nucleação e crescimento. Por meio dessa teoria, chega-se a uma medida da cinética global da fração volumétrica transformada, $V_v(t)$, como função do tempo de reação. Todavia essa equação só é válida quando $V_v(t) \ll 1$, pois, à medida que um grão cresce, passa a colidir com outros grãos e começa a interferir no crescimento do seu vizinho, ocasionando o fenômeno conhecido por "*impingement*".

O "*impingement*" é o "choque" entre as interfaces de grãos em crescimento, que impede ou diminui a possibilidade de crescimento uns dos outros.

Então, inseriu-se o conceito de fração volumétrica estendida, $V_E(t)$, que ignora o "*impingement*". Assim, o volume recristalizado obtido por esse caminho é muito maior do que

o seu volume real, e é chamado de volume estendido [34], [35]. Essa unidade é dividida pelo volume total da matriz, onde ocorre o crescimento dos novos grãos, sendo chamada de fração volumétrica estendida (V_E). A equação (6) mostra a relação entre $V_v(t)$ e $V_E(t)$.

$$V_v = 1 - \exp(-V_E) \quad (6)$$

A solução analítica de JMAK obtida considera os núcleos com formato esférico, a nucleação por saturação de sítios, ou seja, considera que todos os núcleos surgiram, nos instantes iniciais da reação. N_v é o número de núcleos por unidade de volume e G é a velocidade de crescimento. Resultando na conhecida equação (7) para modelo analítico em 3D:

$$V_v(t) = 1 - \exp\left(-\frac{4\pi}{3} N_v G^3 t^3\right) \quad (7)$$

A cinética global para modelos em 2D é representada pela equação (8):

$$V_v(t) = 1 - \exp(-\pi N_A G^2 t^2) \quad (8)$$

Apesar da teoria de JMAK ser amplamente empregada, ela possui limitações, que foram feitas para a dedução destas equações, a saber [36]:

- As transformações devem ocorrer em um meio infinito;
- Os núcleos devem estar distribuídos de forma uniformemente aleatória no espaço;
- Os núcleos possuem uma forma geométrica similar e seu crescimento irá cessar quando ocorrer a colisão entre as regiões transformadas.
- O crescimento deve ser isotrópico.

Essas restrições nem sempre são satisfeitas em sistemas reais, o que causa um desvio da cinética de JMAK.

A cinética de formação da fase sigma inicia com nucleação nos campos de alta energia, como: contornos de grãos, pontos triplos de grãos ou discordâncias [37]. Estes núcleos formam-se, predominantemente, nos contornos entre ferrita-ferrita e ferrita-austenita, em temperaturas entre 600°C e 950°C [38].

Dehoff relacionou a área superficial estendida com a fração volumétrica para determinar a área superficial real conforme mostrado na equação (9):

$$S_v = (1 - V_v) S_{VE} \quad (9)$$

Para o caso do crescimento dos grãos no tempo em 2 dimensões é utilizada a equação (10):

$$L_A(t) = 2\pi N_A G^2 t (\exp(-\pi N_A G^2 t^2)) \quad (10)$$

Onde $L_A(t)$ é o comprimento por unidade de área, G a velocidade de transformação, N_A é o número de núcleo por unidade de área e t , o tempo de transformação.

4.5 VISÃO COMPUTACIONAL

Modelos computacionais são tentativas de analisar predições físicas ou consequências de teorias científicas. As simulações computacionais, também fornecem importante alternativa para o auxílio em técnicas da ciência experimental, quando os fenômenos não são observáveis ou quando as medidas são impraticáveis ou inviáveis financeiramente. A experimentação numérica ou computacional, tem se tornado uma tendência real nas últimas décadas.

Uma simulação de evolução microestrutural que recebia alimentação indireta de dados experimentais foi apresentada em trabalhos recentes [39]. Os dados eram indiretamente fornecidos para a simulação computacional. Primeiro era realizado procedimentos experimentais estatísticos para se obter os resultados, e somente depois disto os dados eram fornecidos para simulação computacional. Assis [40] publicou um trabalho, no qual eram simuladas recristalizações de diferentes componentes de texturas cristalográficas. Rios et al [41] também publicou um artigo sobre a evolução de reações simultâneas simuladas pelo método do cone causal, na qual os dados de entrada do programa foram obtidos via bibliografia de trabalhos experimentais de outros grupos de pesquisa.

Diversos autores utilizaram técnicas de elementos finitos para determinar as frações volumétricas [42]. Outra forma de determinar é a partir de uma micrografia real devidamente tratada computacionalmente[43]. A esse tratamento dá-se o nome “processamento digital de imagens”, no qual ocorre a manipulação de imagens por meio de um processador [43].

A partir da matriz de pixels que representa a imagem, diversos tipos de processamento digital podem ser implementados por algoritmos computacionais. Esses algoritmos realizam as transformações necessárias para que se possa, por exemplo, obter uma imagem com contrastes pretendidos ou extrair atributos ou informações pertinentes [43].

4.5.1 Método do cone causal

No processo de nucleação por saturação de sítios, após a formação dos núcleos gerados, inicia-se o processo de crescimento desses núcleos até que ocorra a completa transformação na matriz. O método do cone causal é utilizado no modelo computacional para o crescimento dos núcleos. Na Figura 10 é mostrado o método do Cone Causal em 3D.

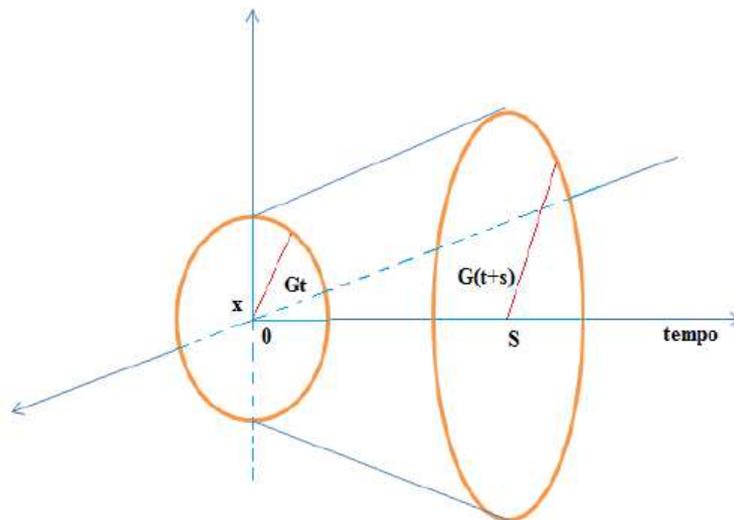


Figura 10 Representação em 3D do Cone Causal.

Esse método é definido como a região espaço-tempo (s e t) em que pelo menos um evento de nucleação tem que ocorrer para cobrir o ponto x no tempo [44], ou seja, essa região é uma esfera de raio R centrada em um ponto x qualquer na matriz que será transformado se houver pelo menos um núcleo dentro dessa esfera. A medida que o tempo evolui, acontecendo cada interação de tempo, o raio R da esfera aumenta (Gt), possibilitando uma maior probabilidade da presença de núcleos para transformar o ponto x .

A evolução da simulação se dá através das interações ao longo do tempo. Para cada interação o programa analisa todos os pontos da matriz para a verificação de quais serão transformados.

A maneira com que essa verificação ocorre é através do cálculo da distância da esfera em relação ao núcleo, se a distância entre núcleo e esfera for menor que zero, significa que o núcleo está dentro da esfera.

A Figura 11, ilustra a teoria do cone causal em 2D, tratando-se de 2D, substitui-se esfera por circunferência. O programa de simulação tem sua evolução através das interações a cada intervalo de tempo. Para cada interação todos as células da matriz são analisadas, assim considera-se que cada célula é um ponto centro da esfera do cone causal e verifica-se qual célula será transformada naquele tempo.

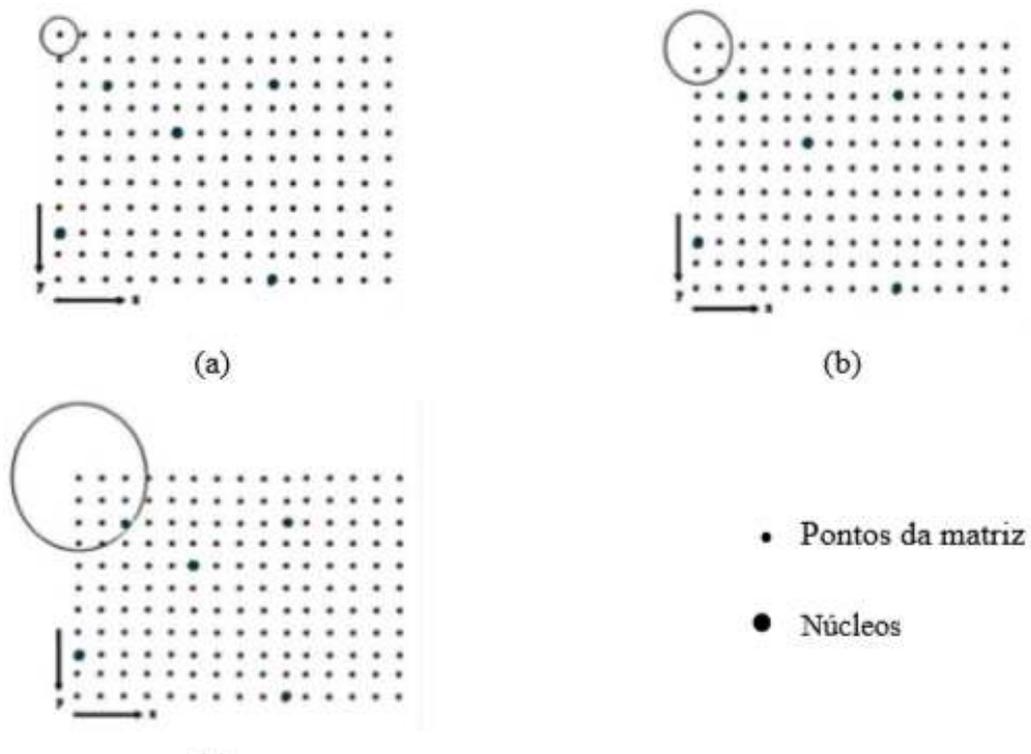


Figura 11 Teoria do cone causal representada em 2D: (a) Tempo igual a 1, (b) Tempo igual a 2, (c) Tempo igual a 3, onde ocorre a transformação da célula que é o ponto centro da circunferência.

[45]

Ao término da transformação, após o crescimento dos grãos via cone causal e a total transformação da matriz, na saída de dados ocorre a escrita de todos os arquivos com os dados da simulação. Utiliza-se então estes arquivos para a elaboração dos gráficos e microestruturas.

4.6 PROPRIEDADES MECÂNICAS DOS AÇOS INOXIDÁVEIS

Na seleção de materiais para um projeto de produto, os requisitos funcionais estabelecidos devem ser atendidos, sendo as propriedades mecânicas umas das características mais importantes para aplicações de engenharia.

As propriedades mecânicas determinam a maior ou menor capacidade que o material tem para transmitir ou resistir aos esforços que lhe são aplicados [46].

As propriedades mecânicas dos materiais metálicos estão diretamente relacionadas ao tipo de microestrutura existente na liga de estudo. O aspecto microestrutural, por sua vez, é influenciado pelo tratamento térmico ou superficial exigido no processamento do material[46].

Ao se comparar as propriedades mecânicas dos aços inoxidáveis, observa-se que o aço inoxidável duplex possui aproximadamente o dobro de resistência ao escoamento ao ser comparado com os aços inoxidáveis austeníticos. Possui propriedades superiores também de resistência à tração, alongamento mínimo e dureza [2].

As principais propriedades mecânicas dos aços austeníticos e aços duplex estão representadas no Quadro 5.

Quadro 5 Comparação entre as propriedades mecânicas dos aços inoxidáveis de microestrutura dúplex com ligas austeníticas.
Fonte: [18]

AISI/UNS	Resistencia ao escoamento MPa	Resistencia à tração MPa	Alongamento Mínimo %	Dureza Vickers	Microestrutura
304 L	210	515-680	40	155	Austenita
316 L	220	515-690	40	160	Austenita
S 32304	400	600-820	25	230	Duplex
S 31803	450	680-880	25	260	Duplex
S 32750	550	800-1000	25	290	Duplex

Utilizando a fração volumétrica de cada fase presente nos aços em estudo combinado com os valores médios das propriedades mecânicas pode-se estimar um valor da propriedade mecânica através do conceito apresentado na regra da mistura. No caso dos aços duplex as fases seriam as microestruturas ferrita (α) e da austenita (γ).

4.7 REGRA DA MISTURA

A formulação dessa regra é feita a partir de uma analogia e generalização da regra aplicada para misturas ideais, na qual a propriedade da mistura é uma ponderação das propriedades dos componentes puros, introduzindo um fator de ponderação alternativo à fração molar (ou mássica), que seria avaliado como função da composição da mistura. As constantes do modelo são obtidas a partir da ideia de uma composição local característica com considerações simplificadas de volume e área superficial das moléculas dos compostos na mistura.

A equação geral da regra da mistura pode ser vista na equação (11):

$$P = P_1 V_{v_1} + P_2 V_{v_2} \dots P_n V_{v_n} \quad (11)$$

Onde P é a propriedade da mistura, $P_1 \dots P_n$ são os valores da propriedade de cada componente e $V_{v_1} \dots V_{v_n}$ são os valores da fração volumétrica de cada componente da mistura.

A dureza em qualquer ponto de um material pode ser calculada usando-se a lei das misturas, uma vez conhecidas as frações volumétricas de seus constituintes [42].

As propriedades mecânicas, como o módulo de elasticidade e a resistência a tração, são fortemente influenciadas pelo conceito de fração volumétricas [47].

A interação de duas ou mais fases em um material permite a obtenção de propriedades diferentes.

5 METODOLOGIA

Nesse trabalho, foi utilizado o modelamento computacional a partir de uma micrografia real do aço inoxidável duplex SAF 2205 submetido a um tratamento térmico de envelhecimento à 800°C. Na Figura 12 é apresentado o diagrama esquemático para obtenção dos resultados:

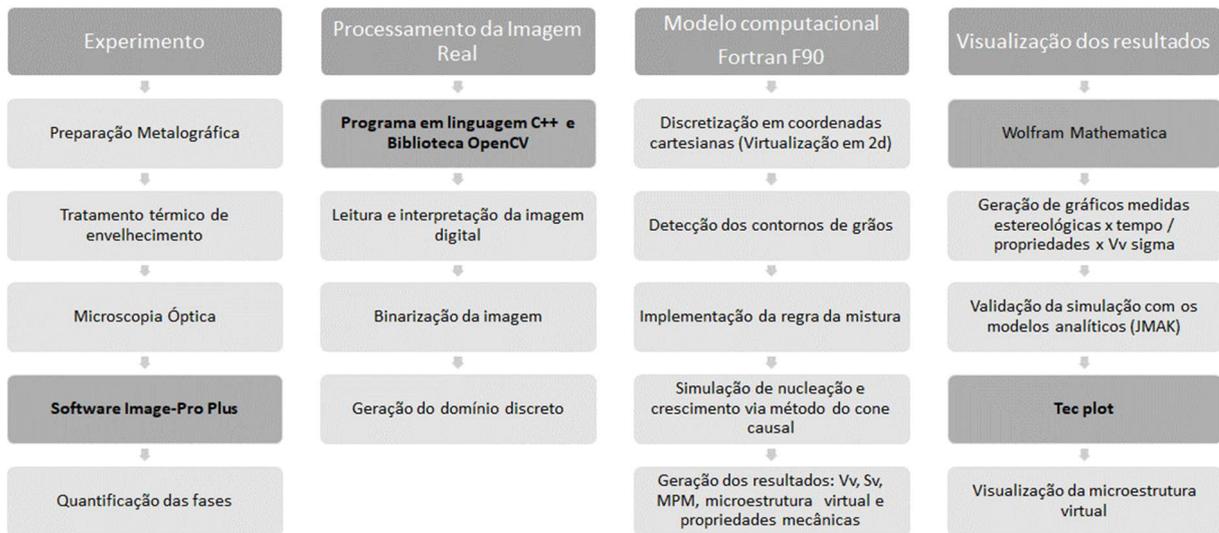


Figura 12 Diagrama esquemático do passo a passo das ferramentas e técnicas utilizadas para obtenção dos resultados.

Foi utilizado o método do Cone Causal para a simulação das reações com nucleação e crescimento, que podem ocorrer de forma homogênea ou não homogênea. Assim, comparam-se os resultados gerados pela simulação computacional com a solução analítica, a fim de atestar que as simulações ocorrem da maneira esperada.

Foi utilizado o programa computacional desenvolvido no Núcleo de Modelamento Microestrutural escrito em linguagem Fortran 2003, e compilado pelo Microsoft Visual Studio 2012. A visualização das microestruturas transformadas foi realizada com o programa Tecplot 360TM, os gráficos serão construídos com o auxílio do programa Wolfram Mathematica 12®.

Foram feitas alterações no modelo original, pois o modelo numérico estava preparado para os casos de nucleação onde a fase formada podia nuclear e crescer por toda matriz.

Para o caso estudado nesse trabalho, a nucleação e crescimento dos precipitados ocorreram preferencialmente na fase ferrita, limitando a área superficial em $V_{v\text{final}}$.

O programa desenvolvido simulou a partir de micrografia real, a formação da fase sigma consumindo somente a ferrita, ou seja, mantendo a fração volumétrica da austenita constante, bem como, determina o limite de resistência a tração do material com a variação dos componentes da microestrutura.

5.1 MATERIAL

O material estudado foi o aço inoxidável duplex SAF 2205 recebido na forma de barra extrudada laminada com dimensões de 500 mm de comprimento e 38,10 mm de diâmetro. Recebeu tratamento de solubilização conforme a norma ASTM A182 grade F51. A composição química e propriedades mecânicas são apresentadas no Quadro 6 e no Quadro 7 , respectivamente.

Quadro 6 Composição química do aço inoxidável duplex (% em peso).
Fonte: Villares Metals

C	Mn	P	S	Si	Cu	Cr	Mo
<i>0,016</i>	<i>1,61</i>	<i>0,020</i>	<i><0,0010</i>	<i>0,48</i>	<i>0,09</i>	<i>22,61</i>	<i>2,60</i>
V	Nb	Ni	N	Co	W	Ti	Al
<i>0,06</i>	<i>0,01</i>	<i>4,63</i>	<i>0,18</i>	<i>0,04</i>	<i>0,02</i>	<i><0,005</i>	<i>0,009</i>

Quadro 7 Propriedades mecânicas do material estudado.

Limite de Resistência (MPa)	Limite de Escoamento (MPa)	Estricção %	Alongamento %
<i>731</i>	<i>520</i>	<i>80,80</i>	<i>39,60</i>

5.2 MÉTODOS

5.2.1 Experimento

A barra extrudada do aço inoxidável duplex SAF 2205 foi cortada em amostras cilíndricas (Figura 13) medindo aproximadamente 38,10 mm de diâmetro x 14 mm de espessura.



Figura 13 Amostra inicial obtida da barra de aço inoxidável duplex SAF 2205 cortada na dimensão de 38,10 mm de diâmetro x 14 mm de espessura.

Fonte: O autor, 2019.

A partir de uma amostra cilíndrica foram obtidas 8 amostras no formato conforme Figura 14.



Figura 14 Amostra cortada do aço inoxidável duplex SAF 2205 utilizada para o tratamento térmico de envelhecimento.

Fonte: O autor, 2019.

Duas das 8 amostras foram embutidas na direção transversal e longitudinal para análise da microestrutura conforme recebido. As demais amostras foram utilizadas para o tratamento térmico de envelhecimento à 800°C.

5.2.1.1 Tratamento térmico de envelhecimento

Antes de realizar o tratamento térmico de envelhecimento, foi utilizada uma amostra para levantar a curva de aquecimento típica do material para se obter o tempo no qual a amostra estaria estabilizada à temperatura de 800°C.

Para o aquecimento, utilizou-se um forno de resistência elétrica da Brasimet disponível no laboratório de tratamento térmico da EEIMVR. Após o aquecimento do forno à 800°C, uma das amostras foi introduzida e retirada após a temperatura indicada atingir 800°C.

Um termopar foi conectado ao aparelho Spider 8, que recebe informações a cada segundo e as transfere para o software Catman 4.5. Este registra os dados em arquivo do Excel na forma de valores em tabela e gráficos. Na análise dos dados, foi possível verificar que o tempo que a amostra atingiu a temperatura de estabilização de 800°C foi de 1.096 segundos, equivalente a 18 minutos, a partir de onde foi iniciada a contagem dos tempos de tratamento térmico de envelhecimento para as demais amostras.

Feito esse procedimento, as demais amostras foram colocadas sobre uma placa refratária, afastadas uma das outras de maneira a permitir uma troca de calor mais uniforme durante o aquecimento e introduzidas de uma única vez no interior do forno que já se encontrava à temperatura de 800°C.

A retirada das amostras se deu obedecendo aos tempos descritos na Tabela 1 de forma rápida na qual a abertura e fechamento do forno foram feitos de maneira que não interferissem nos resultados. Ao serem retiradas, passaram por um resfriamento rápido à água para se evitar a precipitação de outras fases e obter um controle de crescimento mais eficaz em relação ao tempo de tratamento.

Tabela 1 Tempos de tratamento isotérmico de envelhecimento de cada amostra e tempo total considerando encharque em 18 min.
Fonte: O autor, 2019.

Amostra	Tempo (min)	Tempo total (min)
1	15	33
2	60	78
3	90	108
4	240	258
5	540	558

Após a realização do tratamento térmico, as amostras foram preparadas para análise microestrutural.

5.2.1.2 Preparação Metalográfica

Todas as amostras foram lixadas com lixa d'água de carbeto de silício de granulometria de 120 a 2500 mesh utilizando uma lixadeira metalográfica manual.

Posteriormente ao lixamento, as amostras foram polidas para que se obtivessem superfícies planas e isentas ou com o mínimo de arranhões em uma politriz manual utilizando panos para polimento para diferentes granulometrias de pasta de alumina, realizados em duas etapas, inicialmente com pasta de 1 μm e finalizando com a pasta de 0,05 μm .

Na análise microestrutural, a fim de se revelar as microestruturas presentes no material, procedeu-se o ataque eletrolítico seletivo composto por uma solução de 40 g de hidróxido de potássio (KOH), 100 ml de H_2O , com imersão de 20s, utilizando uma voltagem de 5V, uma placa de aço inoxidável como catodo e foi utilizado uma fonte Instrutherm FA-3050, disponível no laboratório de tratamento térmico da EEIMVR.

5.2.1.3 Microscopia óptica

Após as etapas de preparação metalográfica e ataque, as amostras foram analisadas no utilizando-se o microscópio Óptico OLYMPUS BX51M. Com auxílio de uma câmera digital OLYMPUS SC30, conectada a um sistema de aquisição de imagens e acoplada ao microscópio óptico para análise da microestrutura e obtenção das imagens.

A Figura 15 apresenta a microestrutura do material na condição como recebido (solubilizado de maneira como fornecido pela Villares Metals).

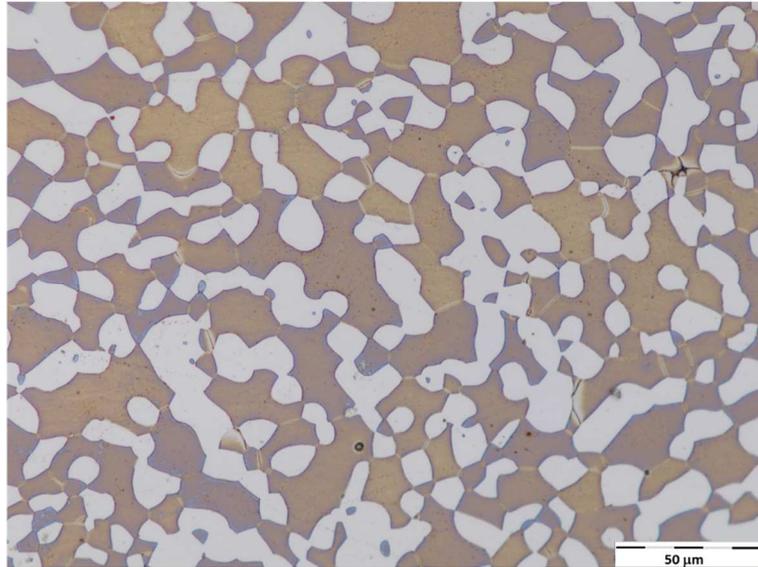


Figura 15 Micrografia do material estudado aço inoxidável duplex SAF 2205 como recebido. Parte bege representa a fase ferrita e parte branca, austenita.

Fonte: [48]

Foi possível notar que a microestrutura se apresenta livre de precipitados, onde essa microestrutura é característica dos aços inoxidáveis duplex, sendo composta por matriz ferrítica (bege) e ilhas de austenita (branca).

5.2.1.4 Quantificação das fases

Foram registradas 35 imagens obtidas através do microscópio óptico com aumento de 500x para cada amostra. Foi realizada quantificação das fases em todas as 35 imagens registradas por amostras através da função *Measure Phase*, que pertence ao *software* Image-Pro Plus.

O Image-Pro é uma plataforma de análise de imagens que oferece ferramentas intuitivas que facilitam a captura, processamento, medição, análise e compartilhamento de imagens e dados. É comumente empregado na caracterização de materiais em diversas áreas de pesquisa. Em engenharia, é usado para quantificar e visualizar dados obtidos por microscopia ótica.

As etapas para realização da distinção e quantificação das fases foram conforme a seguir:

- Após iniciar o *software*, carrega-se a imagem na qual será feita a quantificação de fase;
- Ajusta-se a calibração na qual a imagem foi obtida;
- Utiliza-se a função *Analysis*;
- Por último, adiciona-se a função *Measure Phase* e *Measure Phase Statistics*, em seguida com 2 cliques em *Measure Phase*, uma nova janela é aberta onde se faz o ajuste de delimitação e coloração de cada fase através da função *Phase Threshold Selection*, conforme representado na Figura 16.

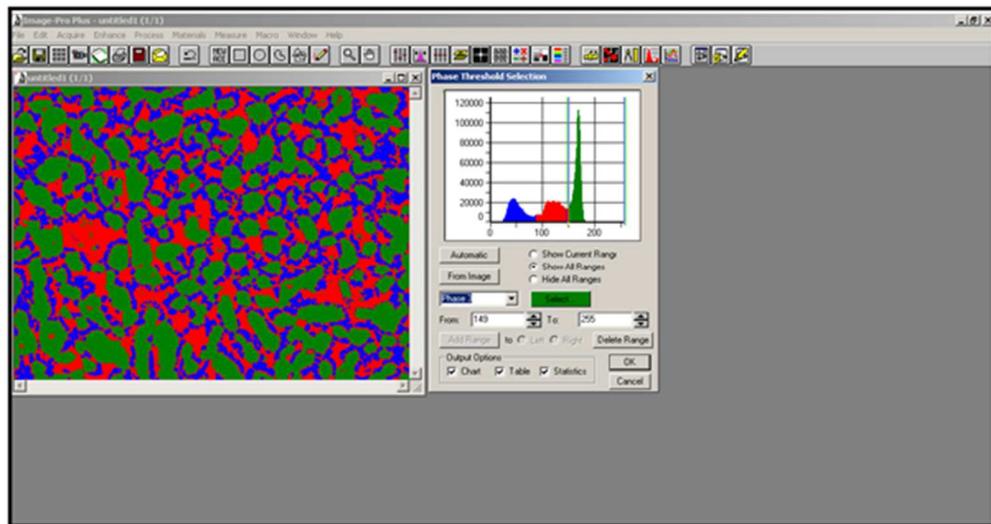


Figura 16 Tela do software Image-Pro Plus com a quantificação das fases a partir da micrografia real do aço 2205 envelhecido à 800°C.

Fonte: Laboratório de caracterização EEIMVR 2014.

Após todas as imagens serem quantificadas, foi feito o cálculo da média, desvio padrão e erro padrão para cada amostra.

A média dada a partir da equação (12) foi calculada com os dados fornecidos na quantificação de fase das 35 imagens de cada amostra.

$$\bar{x} = \frac{\sum V_v}{n} \quad (12)$$

Onde, V_v é a fração volumétrica de cada fase e n é o número de micrografia obtida de cada amostra.

Determinado os valores das médias, foi realizado o cálculo do desvio padrão amostral (S) conforme a equação (13):

$$S = \sqrt{\frac{\sum(x - \bar{x})^2}{n - 1}} \quad (13)$$

Onde, \bar{x} é a média da fração volumétrica de cada amostra de aço, x é a fração volumétrica de cada micrografia de cada amostra de aço e n é o número de micrografias obtidas de cada amostra.

O cálculo do erro padrão foi realizado de acordo com a equação (14). Esta equação de erro pode ser utilizada quando se tem um conjunto de dados amostral maior que 30 ($n > 30$), que no caso se enquadra no conjunto de dados para o cálculo fração volumétrica das fases.

$$\text{Erro padrão} = \frac{2S}{\sqrt{n}} \quad (14)$$

Onde, S é o desvio padrão amostral e n o número de amostras (micrografias obtidas de cada amostra de aço submetida a tratamento térmico de envelhecimento).

5.2.2 Processamento das imagens

Os processos de visão computacional muitas vezes requerem uma etapa de ajuste da imagem. Estes ajustes envolvem a passagem de filtro para remover o ruído do processo de aquisição de imagem, melhorias na resolução e etc.

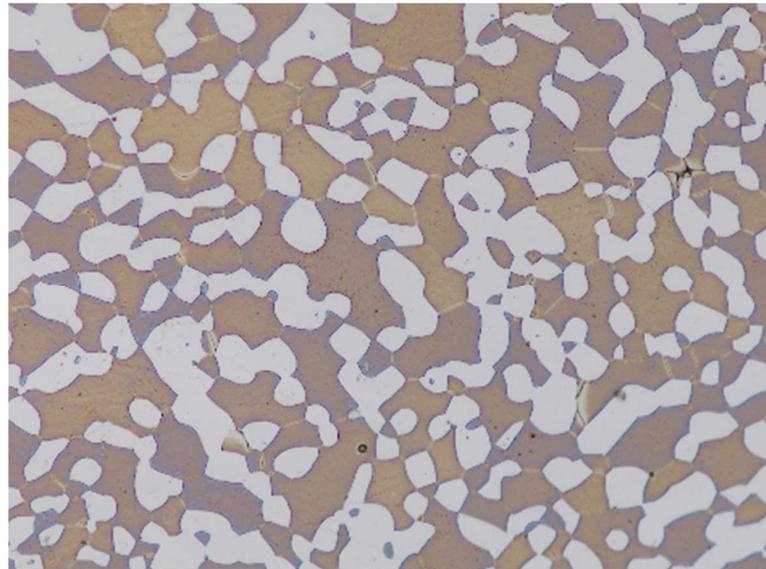
A partir da micrografia real (Figura 15), um domínio real em 2d foi obtido computacionalmente. Os contornos da microestrutura foram detectados por processamento de imagem digital.

A interpretação da imagem digital e seu processamento subsequente foram feitos a partir de um código computacional escrito em C ++ (APENDICE).

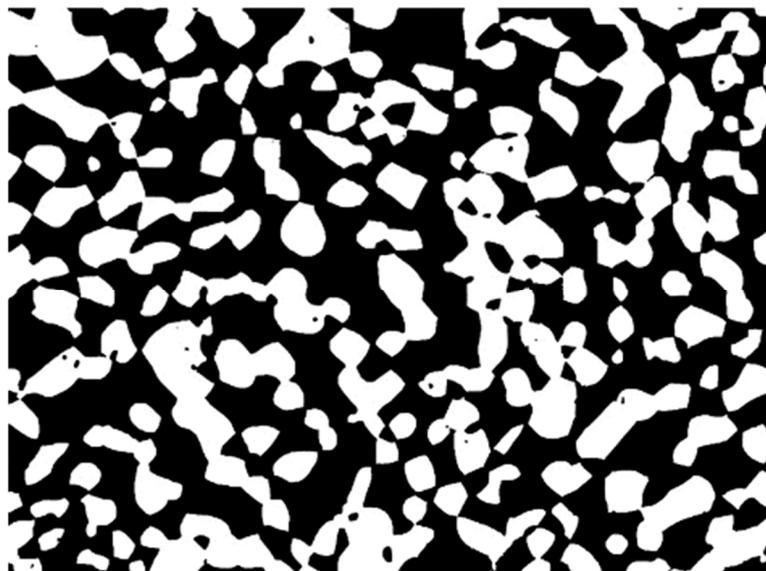
Primeiramente realizou-se uma binarização da imagem para obter o máximo contraste entre as fases e assim facilitar a identificação de cada fase computacionalmente.

Após, foi feito um tratamento nas imagens originais que reduzem a quantidade de cores que as mesmas possuem, passando essa quantidade para apenas duas cores: preto e branco. Esse processo é chamado binarização devido à quantidade de cores que elas passam a apresentar após sua aplicação.

Para aplicar o processo de binarização em uma imagem, o primeiro passo foi transformar uma imagem original colorida (Figura 17 (a)) em uma imagem que contenha apenas tons de cinza. A imagem digital na escala cinza pode ter duzentos e cinquenta e seis (256) ou mais níveis de tons de cinza, e após a aplicação do processo de binarização a imagem digital final (Figura 17 (b)), passa a ter seus níveis reduzidos à somente dois: preto e branco.



(a)



(b)

Figura 17 (a) Micrografia real do aço duplex 2205 (b) Micrografia do aço duplex binarizada.
Fonte: O autor, 2019.

O código implementado para fazer a transformação das imagens coloridas para escala cinza e posteriormente binarizá-las foi desenvolvido com o auxílio da biblioteca OpenCV.

No processo de binarização, 0 foi atribuído àqueles com cor preta (ferrita), e 1 para as regiões de cor branca (austenita).

Assim, uma matriz foi obtida para ser interpretada pelo modelo computacional desenvolvido em Fortran.

5.2.3 Modelo computacional

5.2.3.1 Detecção dos contornos de grãos

Após a binarização, os dados da imagem digital foram filtrados com um algoritmo de detecção de contorno híbrido. O programa identifica as coordenadas cartesianas desses contornos e salva em um vetor como limite de grão contido no domínio computacional. As coordenadas cartesianas foram geradas de acordo com as dimensões da imagem original (Figura 18). Utilizou-se a resolução de 2048 x 1532 pixels como a área das micrografias extraídas da amostra, este valor representa a resolução máxima da Olympus SC30 digital.

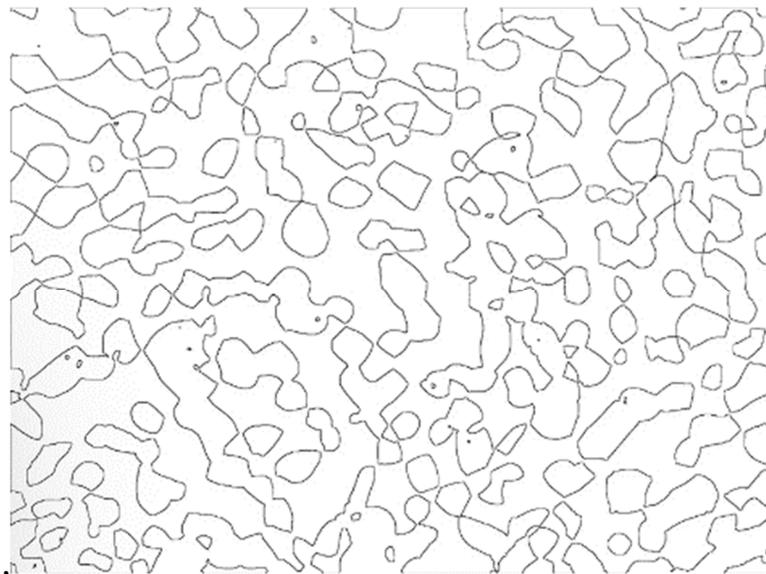


Figura 18 Imagem da microestrutura utilizada na simulação computacional com os contornos de grãos identificados a partir da imagem digital binarizada.

Fonte: O autor, 2019.

Assim, utilizou-se de técnicas computacionais para usar a sintaxe de uma imagem digital e criar um domínio computacional com referências ao espaço discreto com coordenadas cartesianas em duas dimensões. Conseqüentemente, a amostra foi reconstruída numericamente. A amostra virtual agora reconstruída no computador é um domínio computacional, reconstruindo com fidelidade, a amostra real. Domínios computacionais (ou volumes de controle) são regiões nas quais se deseja determinar alterações em variáveis específicas que evoluem de maneira dinâmica e são, geralmente, modelados a partir de equações algébricas, representação de computação gráfica, criação de malhas computacionais a partir de eixos cartesianos, dentre outros sistemas.

5.2.3.2 Simulação computacional

Toda etapa de simulação computacional foi baseada na micrografia do material conforme recebido, ou seja, sem nenhuma fase sigma aparente após passar pelo processamento de imagem e ter os contornos identificados para a nucleação e crescimento da fase sigma a partir dos contornos com sua evolução sob a matriz ferrítica.

A próxima etapa do procedimento numérico foi modelar a nucleação e o crescimento do aço inoxidável duplex. A nucleação ocorreu por saturação de sítios e a velocidade de crescimento foi mantida constante, com crescimento isotrópico e condições de contorno periódicas. A malha foi formada por aproximadamente 3 milhões de pontos, onde 107 mil pontos foram detectados como contornos de grãos.

A nucleação ocorreu aleatoriamente em posições de arranjos identificadas como contornos de grão. O estágio de crescimento foi simulado pelo Método do Cone Causal adaptado às reações de transformação de fase. O modelo de crescimento aplicado neste estudo foi modelado, testado e validado por modelos analíticos em trabalhos anteriores [48].

O modelo computacional original sofreu uma pequena alteração na regra de transição para este estudo. Além de testar se a posição analisada no domínio atendia ou não o critério de mudança de estado para a regra do Cone Causal, foi testado também se a posição na malha era igual a 0 (zero) que representa a ferrita. Este novo critério foi adotado, pois foi necessário adaptar o modelo ao fenômeno físico que ocorre na natureza. Esta mudança também permitiu acompanhar a evolução microestrutural, a partir das microestruturas geradas em cada passo no modelo numérico.

Além dessa alteração, foi incorporado ao modelo um algoritmo para determinação da propriedade mecânica utilizando a equação (15) obtida a partir da equação (11) da regra da mistura adaptada para as fases presentes no aço duplex.

$$P_{D(t)} = P_a V_{v_a(t)} + P_\sigma V_{v_\sigma(t)} + P_f V_{v_f(t)} \quad (15)$$

Onde $P_{D(t)}$, P_a , P_σ , P_f são as propriedades do aço duplex e das fases: austenita, sigma e ferrita, respectivamente.

5.2.4 Obtenção da propriedade mecânica à 800°C

A partir da utilização da lei linear das misturas e dados experimentais disponíveis na literatura [49] foram obtidos os limites de resistência a tração de cada fase.

No trabalho utilizado como base foi obtido experimentalmente a fração volumétrica das fases ferrita, austenita e sigma em três tempos diferentes de tratamento térmico de envelhecimento à 800°C. Aplicando o método de Gauss para solução das equações encontradas, foram obtidos o limite de resistência a tração de cada fase. Essas informações foram inseridas no modelo numérico para determinação da resistência a tração a cada evolução da fase sigma consumindo somente a matriz ferrita e, mantendo a austenita constante.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com a utilização de técnicas de visão computacional e processamento de imagens digital, aliado ao método do Cone Causal foi realizada a simulação da evolução microestrutural da fase sigma (nucleação por saturação de sítios com grãos aleatoriamente distribuídos no contorno de grão ferrítico) nos contornos de grãos de ferrita do aço inoxidável duplex 2205.

Para avaliação da validade da simulação proposta, utilizando-se o *software* Wolfram Mathematica®, os dados da simulação foram comparados com modelo analítico de JMAK.

6.1 CARACTERIZAÇÃO MICROESTRUTURAL

Foram obtidas 35 micrografias de cada amostra envelhecida à 800°C. Com as micrografias obtidas da amostra envelhecida por 15 minutos não foi possível identificar a fase sigma formada. Com isso, a quantificação das fases obtidas com o auxílio do Image-Pro plus não apresentou dados muito confiáveis, sendo descartadas neste trabalho.

A micrografia da Figura 19 refere-se a amostra envelhecida por 60 min, onde ficou evidente que a fase intermetálica (marrom) é formada entre os contornos de ferrita (bege) e ilhas de austenita (branca).

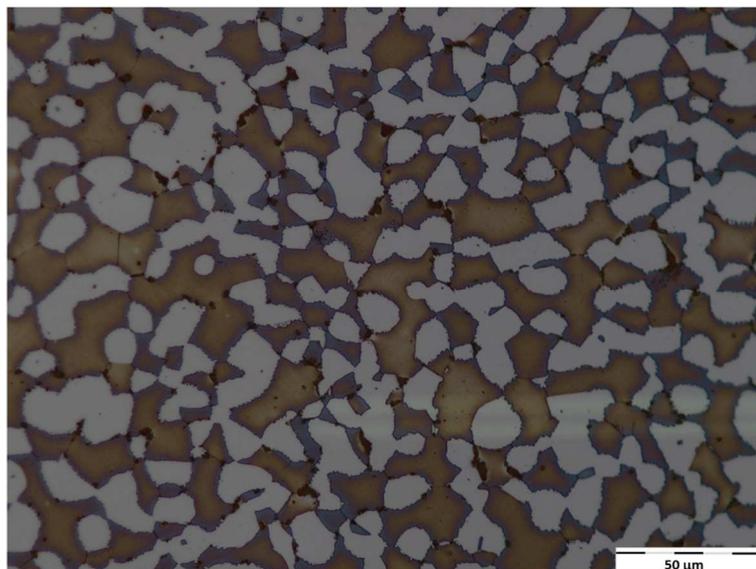


Figura 19 Microestrutura da amostra envelhecida por 60 minutos. Formação da fase intermetálica (marrom) nos contornos de ferrita (bege) e ilhas de austenita (branca).

Fonte: O autor, 2019.

As micrografias obtidas das amostras envelhecidas por 90, 240 e 540 minutos são mostradas pela Figura 20, Figura 21 e Figura 22, respectivamente

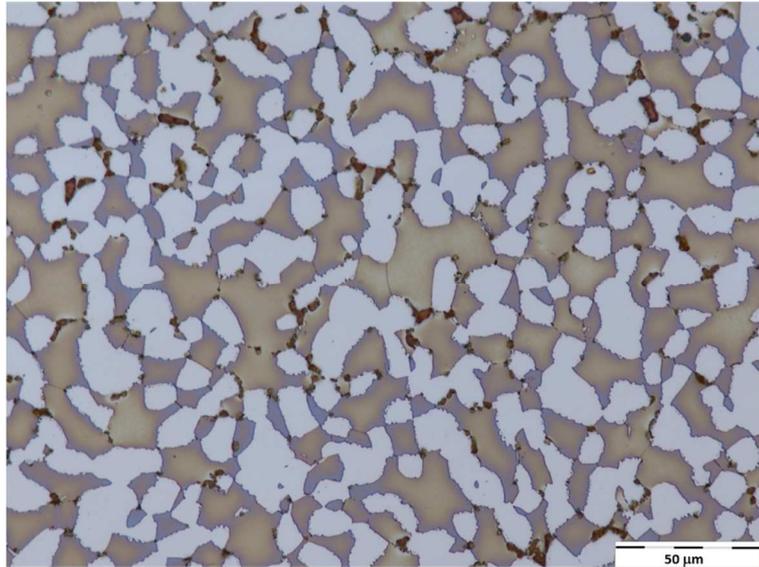


Figura 20 Microestrutura da amostra envelhecida por 90 minutos.
Fonte: O autor, 2019.

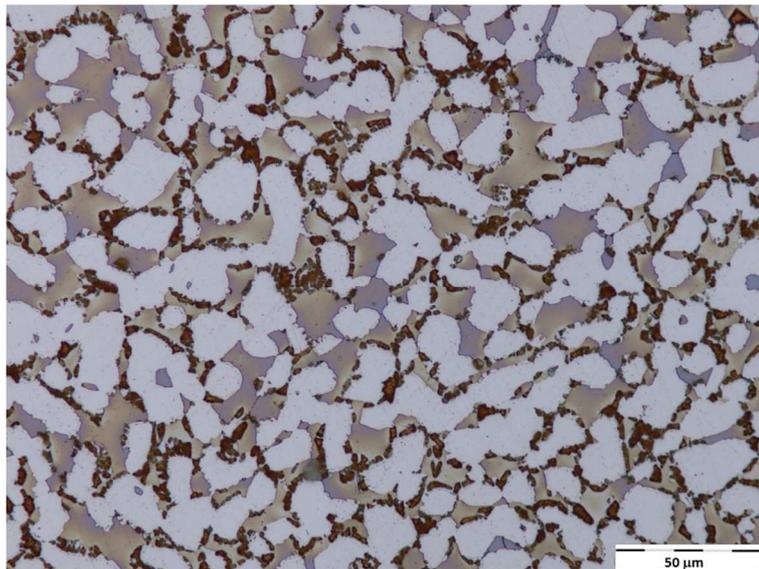


Figura 21. Microestrutura da amostra envelhecida por 240 minutos
Fonte: O autor, 2019.

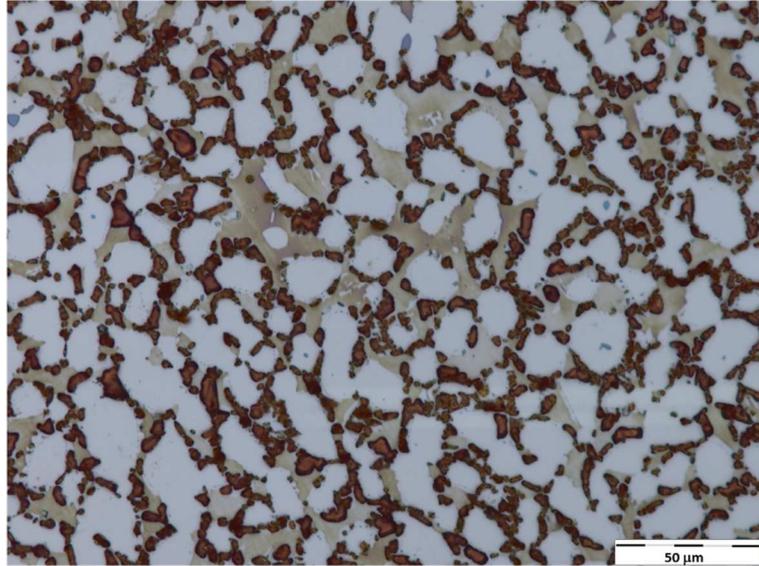


Figura 22 Microestrutura da amostra envelhecida por 540 minutos.

Fonte: O autor, 2019.

Nas micrografias das amostras envelhecidas a 240 e 540 min apresentadas nas figuras Figura 21 e na Figura 22, ficou evidenciado o crescimento da fase sigma (marrom) consumindo a fase ferrita (bege) .

Foi possível notar que a fração volumétrica da fase intermetálica rica em cromo, de coloração marrom escura, que possivelmente seja a fase sigma, aumentou com o tempo de tratamento de envelhecimento.

Dentre as fases intermetálicas ricas em cromo precipitadas durante o tratamento, a fase sigma foi a predominante. Além dessa fase, houve formação da fase chi (χ) que é metaestável, servindo como ponto de nucleação para a fase sigma. Portanto, foi considerado que a precipitação das fases intermetálicas possivelmente seria a fase sigma e a formação da fase sigma consumindo somente a ferrita, ou seja, mantendo a austenita constante.

Com o tratamento foram obtidas as frações volumétricas distintas de fase sigma servindo para validação dos resultados das simulações computacionais.

6.2 QUANTIFICAÇÃO DAS FASES

A Tabela 2 mostra as frações volumétricas média e desvio padrão obtidos a partir dos resultados quantificados das 35 micrografias de cada amostra analisada através do *software* Image-Pro Plus.

Tabela 2 Fração volumétrica média das fases e desvio padrão das amostras.
Fonte: O autor, 2019.

Amostra	Tempo (min)	Tempo total (min)	Vv Sigma / desvio padrão (%)	Vv Ferrita / desvio padrão (%)	Vv Austenita / desvio padrão (%)
1	15	33	-	-	-
2	60	78	10,51 ± 1,18	44,46 ± 2,27	44,54 ± 2,15
3	90	108	11,94 ± 0,94	40,76 ± 2,00	47,31 ± 1,68
4	240	258	20,64 ± 2,06	25,97 ± 1,74	53,45 ± 1,47
5	540	558	32,76 ± 1,68	22,34 ± 2,43	44,50 ± 3,13

Os dados mostrados na Tabela 2 foram utilizados para comparação com os dados gerados via simulação computacional.

6.3 QUANTIFICAÇÃO DAS FASES VIA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Após processamento da imagem real (Figura 15), com a imagem binarizada (Figura 17 b) o modelo computacional identificou a fração volumétrica inicial das fases ferrita e austenita do material.

A fração volumétrica inicial de ferrita e austenita foi de 56,99 % e 43,01%, respectivamente.

Em todo processo de simulação foi considerado a fase austenita constante e a sigma aumentando, conseqüentemente a ferrita diminuindo.

6.4 VALIDAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL

6.4.1 Equações analíticas

A equação (16) representa a teoria JMAK para saturação de sítios numa seção plana.

$$V_v(t) = A_A(t) = 1 - \exp(-\pi N_A G^2 t^2) \quad (16)$$

Onde tem-se que:

V_v , é a fração volumétrica da fase transformada em função da evolução do tempo (t);

A_A , representa a fração por área, sendo a igualdade $V_v = A_A$ válida para 2 ou 3 dimensões;

N_A , representa o número de núcleos inicial por unidade de área;

G, a velocidade de crescimento;

t, o tempo de transformação da fase.

O modelo proposto por DeHoff, demonstrado na equação (17), é utilizado para determinação da unidade do comprimento de interfaces por unidade de área.

$$L_A(t) = 2\pi N_A G^2 t (\exp(-\pi N_A G^2 t^2)) \quad (17)$$

Onde tem-se que:

L_A , representa unidade do comprimento de interfaces por unidade área em função da evolução do tempo (t);

N_A , representa o número de núcleos inicial por unidade de área;

G, a velocidade de crescimento;

t, o tempo de transformação da fase.

Como a formação da fase sigma ocorre a partir dos contornos da ferrita e considerando que a nucleação ocorra somente consumindo ferrita, a fração volumétrica de sigma ($V_{v\sigma}(t)$) é limitada pela fração inicial de ferrita ($V_{vfinitial}$).

Assim, obtém-se a equação (18):

$$V_{v\sigma}(t) = (1 - \exp(-\pi N_A G^2 t^2)) * V_{vfinitial} \quad (18)$$

No decorrer do tempo, a fração volumétrica de ferrita ($V_{vf}(t)$) decai e pode ser demonstrada pela equação (19):

$$V_{vf}(t) = V_{vfinitial} - V_{v\sigma}(t) \quad (19)$$

As equações de (16) a (19) foram utilizadas no *software* Wolfram Mathematica para geração dos gráficos analíticos.

6.4.2 Parâmetros de entrada

Os parâmetros de entrada descritos na Tabela 3 foram inseridos no software Wolfram Mathematica assim como a tabela de dados geradas com a simulação.

Tabela 3 Parâmetros de entrada para modelamento numérico.
Fonte: O autor, 2019.

Parâmetros	Descrição
$n_x \times n_y \times n_z = 820 \times 613 \times 1$	Matriz aço duplex
$n = 300, 600, 1200, 2400, 6000$	Número de núcleos
$N_A = \frac{n}{n_x * n_y}$	Número de núcleos por unidade de área
$G=1$	Velocidade
t	Tempo de simulação para cada número de núcleo simulado
$X_{aust} = 0,43$	Fração volumétrica de austenita
$V_{vfinal} = 0,57$	Fração volumétrica inicial de ferrita

As unidades de tempo e comprimento utilizadas no estudo são adimensionais. O tempo é discreto na simulação, partindo de $t=0$ até a transformação total da matriz ferrita.

Os parâmetros de entrada e equações analíticas foram utilizados para obtenção dos gráficos analíticos. Com os resultados da simulação, tais como, fração volumétrica (ou fração de área) de sigma e ferrita, comprimento por unidade de área, caminho microestrutural em função do tempo de simulação foram plotados os gráficos do modelo numérico.

6.4.3 Fração volumétrica da fase sigma para simulação com 300 núcleos

Considerando como ponto de partida, o número de núcleos inicial de 300, foi plotado o gráfico de fração volumétrica (V_v) ou fração de área (A_A) para modelamento em 2d em função do tempo (t) mostrado na Figura 23 demonstrando que o modelo numérico de simulação

aleatória pela matriz (representado pelos quadrados) está em concordância com o modelo analítico de JMAK (linha contínua).

Para simulação em 2d tem-se que: $V_v = A_A$

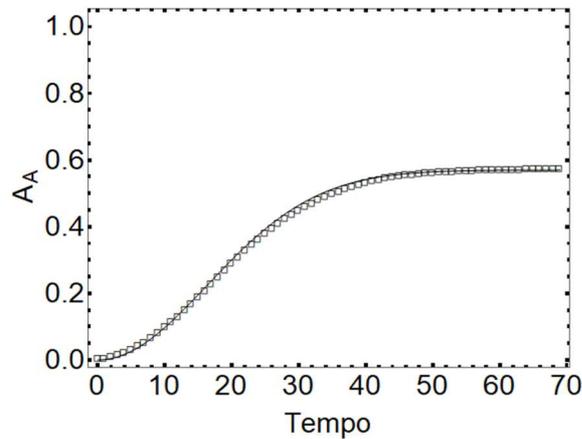


Figura 23 Comparativo dos resultados da fração volumétrica da fase sigma em função do tempo obtidos na simulação e modelo analítico para 300 núcleos.
Fonte: O autor, 2019.

Observa-se que o crescimento da fase sigma foi limitado à máxima fração volumétrica da fase ferrita presente inicialmente na microestrutura real.

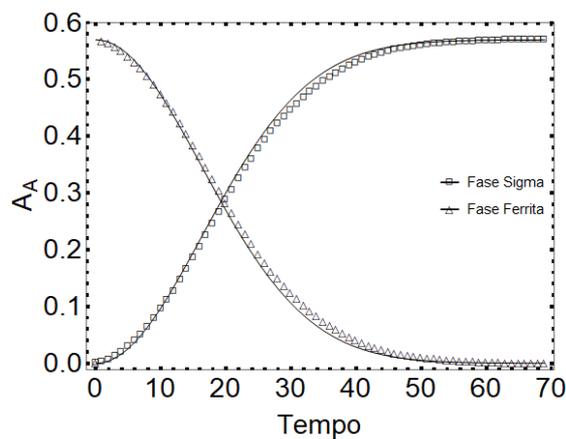


Figura 24 Comparativo dos resultados de fração volumétrica de ferrita e sigma com a evolução do tempo obtidos via simulação e os analíticos.
Fonte: O autor, 2019.

O gráfico mostrado na Figura 24 representa a fração volumétrica da fase sigma aumentando com o tempo e a fase ferrita sendo consumida tanto para a simulação computacional quanto para o modelo analítico (Equações (18) e (19)).

6.4.4 Comprimento das interfaces por unidade de área para simulação com 300 núcleos

A Figura 25 mostra o efeito do número de núcleos na evolução do comprimento interfacial densidade, L_A , entre material transformado e não transformado.

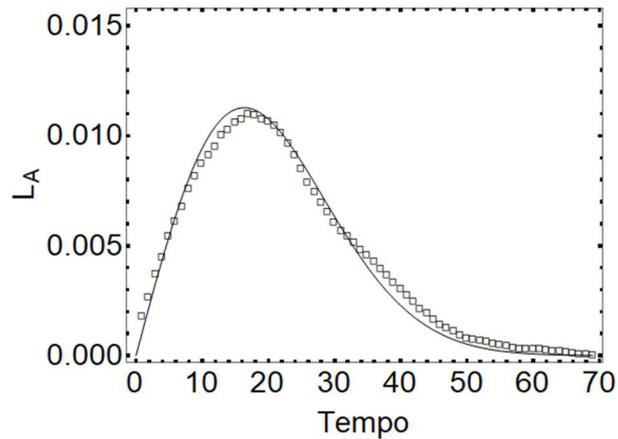


Figura 25 Comparativo dos resultados da área superficial média em função do tempo obtidos na simulação e modelo analítico para 300 núcleos.

Fonte: O autor, 2019.

L_A é importante pois permite visualizar com mais detalhes como a transformação ocorre, o que não é possível somente com a equação de JMAK. Nota-se que as simulações aleatórias na matriz ferrita e o modelo analítico apresentam concordância com modelo proposto por Dehoff (linha contínua).

6.4.5 Caminho microestrutural para simulação com 300 núcleos

O caminho microestrutural é representado pela curva do comprimento interfacial entre região transformada e não transformada por unidade de área, L_A , versus A_A .

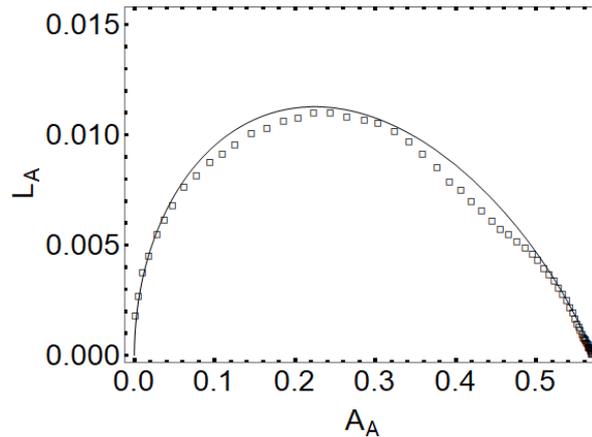


Figura 26 Caminho microestrutural - Simulação versus modelo analítico para 300 núcleos em função do tempo.
Fonte: O autor, 2019.

Com caminho microestrutural mostrado na Figura 26 é possível evidenciar que as formas geométricas foram mantidas ao longo da transformação e que a simulação computacional teve uma boa concordância com o método analítico para o caso específico da matriz ferrita ser toda consumida pela fase sigma formada.

6.4.6 Fração volumétrica para simulação com 600, 1200, 2400 e 6000 núcleos

Os resultados gerados na simulação com a variação do número de núcleos de 600, 1200, 2400 e 6000 são mostrados graficamente na Figura 27..

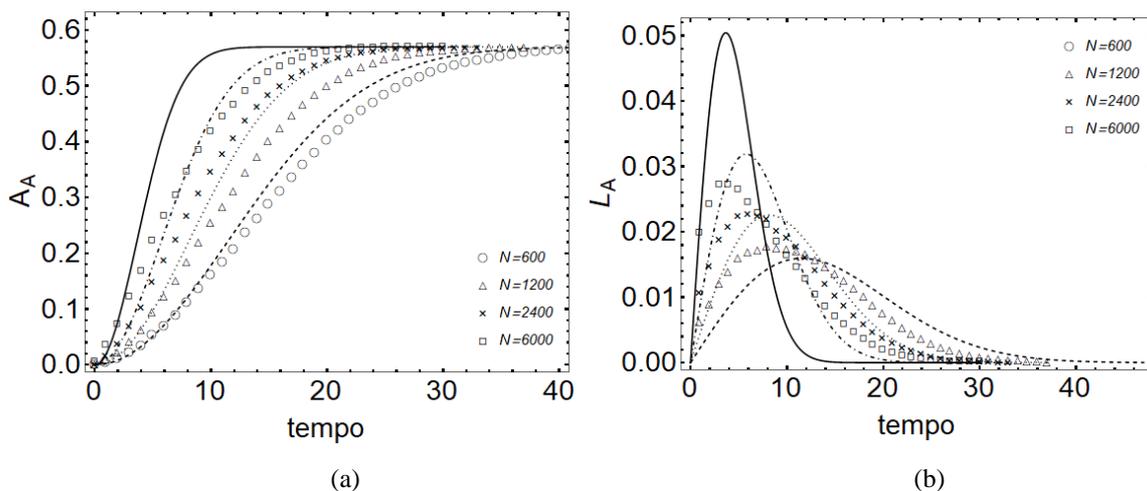


Figura 27 Comparação dos resultados de fração volumétrica (a) e área superficial (b) da fase sigma simulados x analítico com a variação de número de núcleos em função do tempo.

Fonte: O autor, 2019.

Observou-se no gráfico da Figura 27 que, à medida que o número de núcleos aumentou, o modelo numérico (representados pelos ícones \circ / Δ / \times / \square para 600, 1200, 2400 e 6000, respectivamente) se desviou do modelo proposto por JMAK (representado pelas curvas tracejadas, pontilhadas, traços e pontos e linha contínua para 600, 1200, 2400 e 6000, respectivamente).

O desvio encontrado entre o resultado numérico e o modelo proposto por JMAK pode ser explicado pelo aumento da densidade de núcleos da fase sigma formada nos contornos de grão de ferrita, fazendo com que o modelo numérico perdesse sua aleatoriedade.

O resultado para 600 núcleos já demonstrou que o modelo perde a aleatoriedade, porém foram simulados números de núcleos maiores do que 600 para avaliação das micrografias virtuais geradas. A avaliação consistiu na comparação visual entre a micrografia real e virtual.

6.4.7 Caminho microestrutural para simulação com 600, 1200, 2400 e 6000 núcleos

A Figura 28 apresenta o caminho microestrutural simulado com desvio bem acentuado a partir de 600 núcleos até 6000 núcleos.

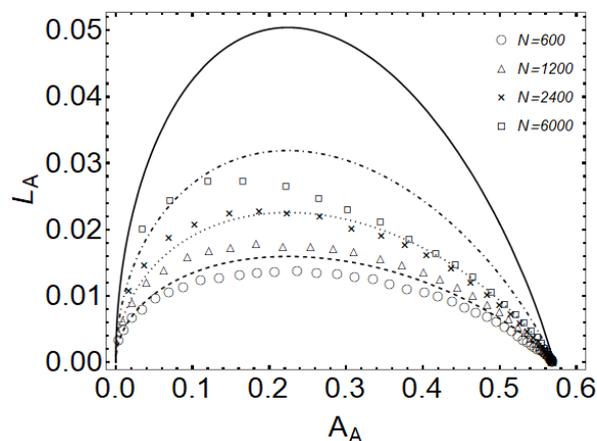


Figura 28 Caminho microestrutural - Simulação versus modelo analítico para 600, 1200, 2400 e 6000 núcleos em função do tempo.
Fonte: O autor, 2019.

Visualizando-se as curvas de caminho microestrutural pode-se afirmar que as formas geométricas foram mantidas ao longo da simulação.

Neste trabalho, nenhum tipo de parâmetro de ajuste foi utilizado e o método do Cone Causal mostrou-se eficiente na simulação de transformações de fase.

6.5 MICROGRAFIAS VIRTUAIS

O modelo considerou a formação da fase sigma nos contornos de ferrita e austenita até o consumo de 100% da ferrita.

Com a simulação foram gerados dados para plotar a imagem a cada percentual desejado de evolução da formação da fase sigma.

Os resultados da formação da fase sigma a partir da micrografia real podem ser visualizados nas micrografias virtuais geradas pelo modelo numérico e plotadas com o auxílio do *software* Tecplot.

O parâmetro variado para cada resultado foi o número de núcleos na microestrutura.

6.5.1 Micrografias virtuais para simulação com 300 núcleos

Na Figura 29, tem-se a representação da microestrutura decorrente das transformações por nucleação e crescimento na interface dos contornos de grãos entre ferrita e austenita. Os resultados foram apresentados em 2d a cada 10% de formação da fase sigma para simulação com 300 núcleos. Os grãos cresceram com velocidade constante e seu formato inicial é aproximadamente esférico, no caso do plano, circular (Figura 29 (a) e (b)).

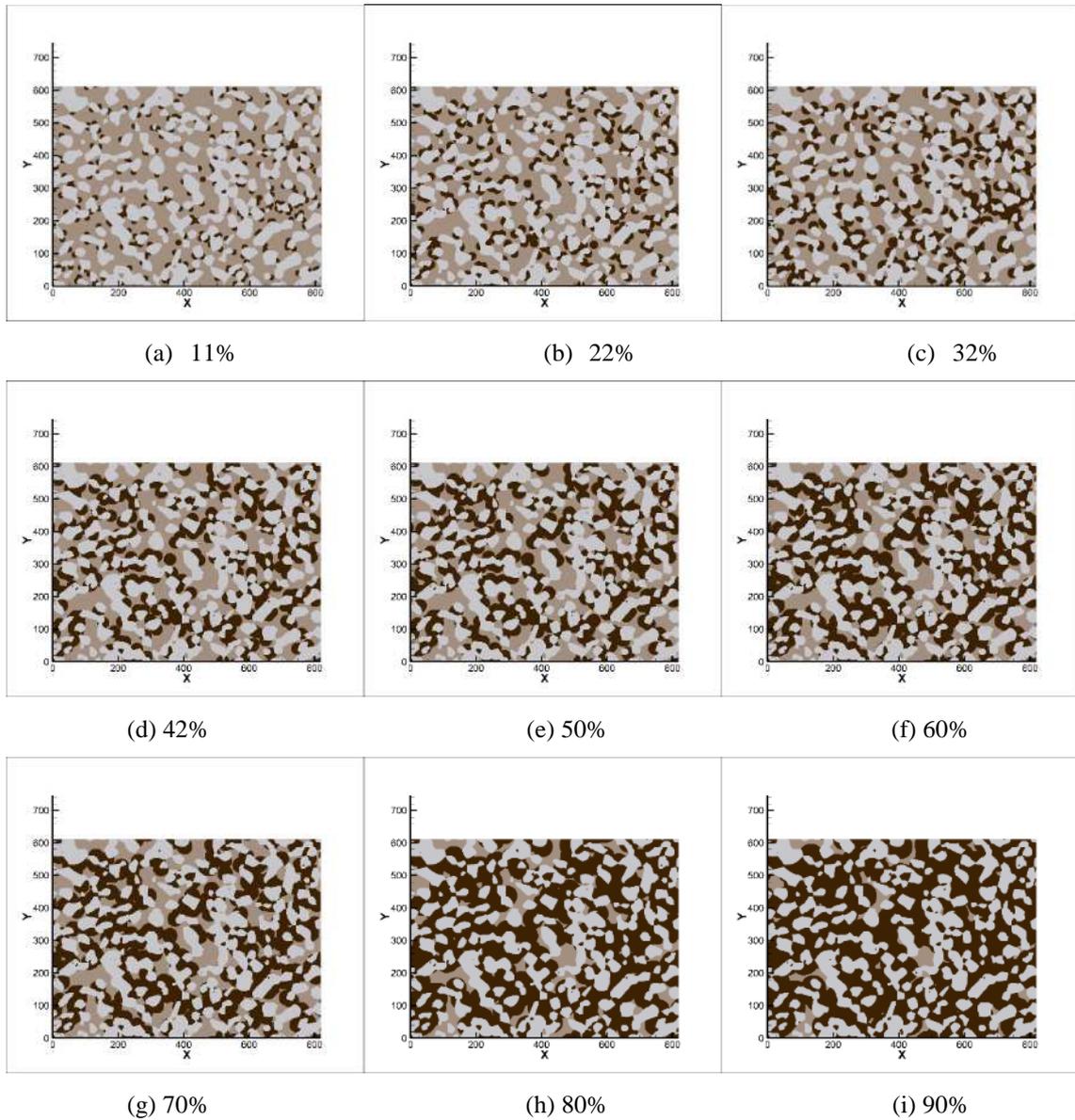


Figura 29 Micrografias geradas a cada 10% da formação da fase sigma para simulação com 300 núcleos.
Fonte: O autor, 2019.

Na Figura 29 (a) é possível observar os grãos com formato esférico, a aleatoriedade entre eles e a não ocorrência do *impingement*. A partir da Figura 29 (c), é possível observar que os núcleos começam a perder o formato esférico devido ao *impingement*. Assim, em (i), tem-se a matriz ferrita 90% transformada.

6.5.2 Micrografias virtuais para simulação com 600 núcleos

As micrografias virtuais obtidas a cada 10% de formação da fase sigma com os dados da simulação computacional com 600 núcleos podem ser vistas na Figura 30.

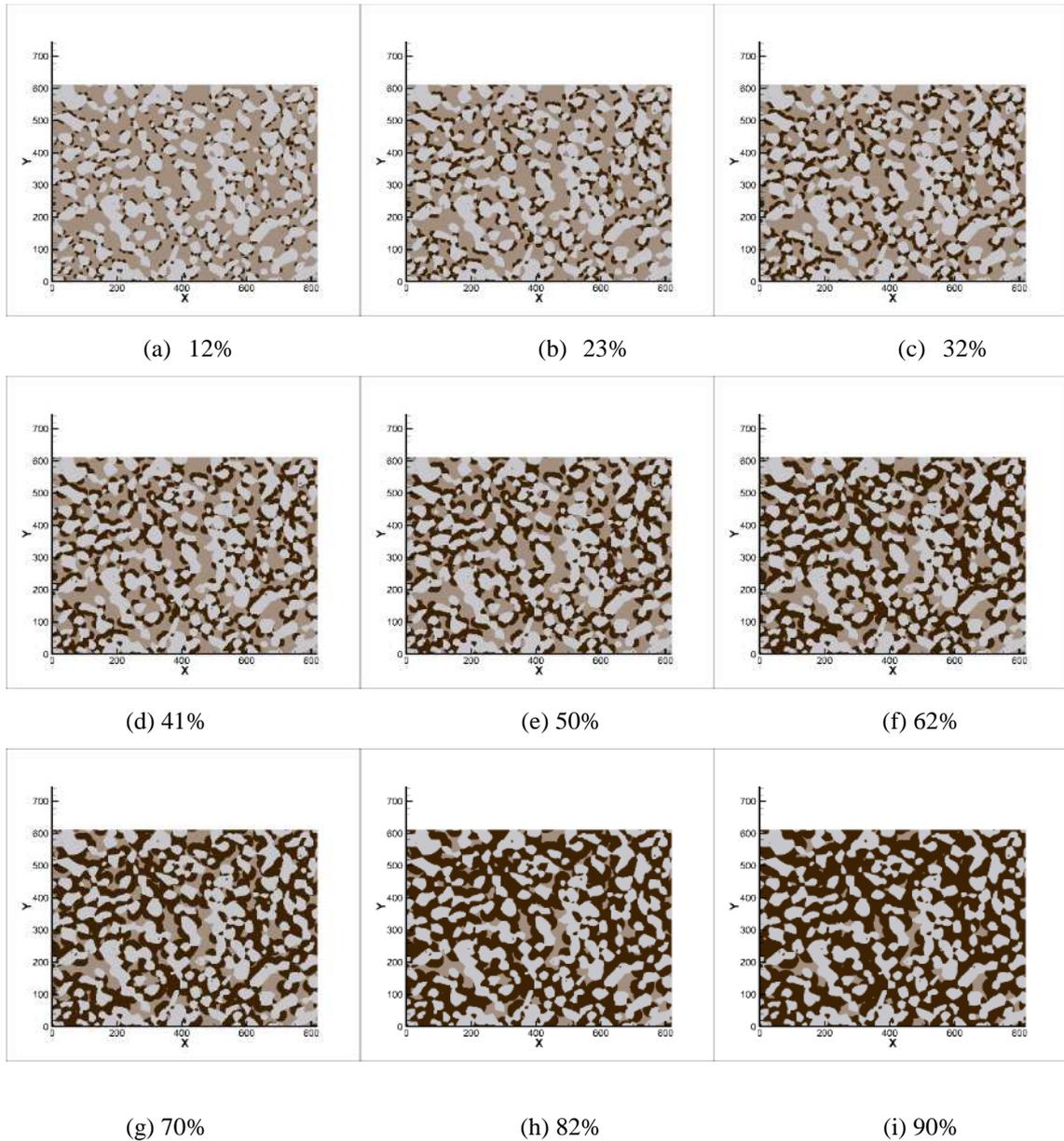


Figura 30 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 600 núcleos.
Fonte: O autor, 2019.

Com as micrografias virtuais obtidas a partir dos dados da simulação computacional com 600 núcleos mostradas na Figura 30, observa-se um resultado muito similar ao da simulação com 300 núcleos.

6.5.3 Micrografias virtuais para simulação com 1200 núcleos

As micrografias virtuais obtidas com os dados da simulação computacional com 1200 núcleos podem ser vistas na Figura 31.

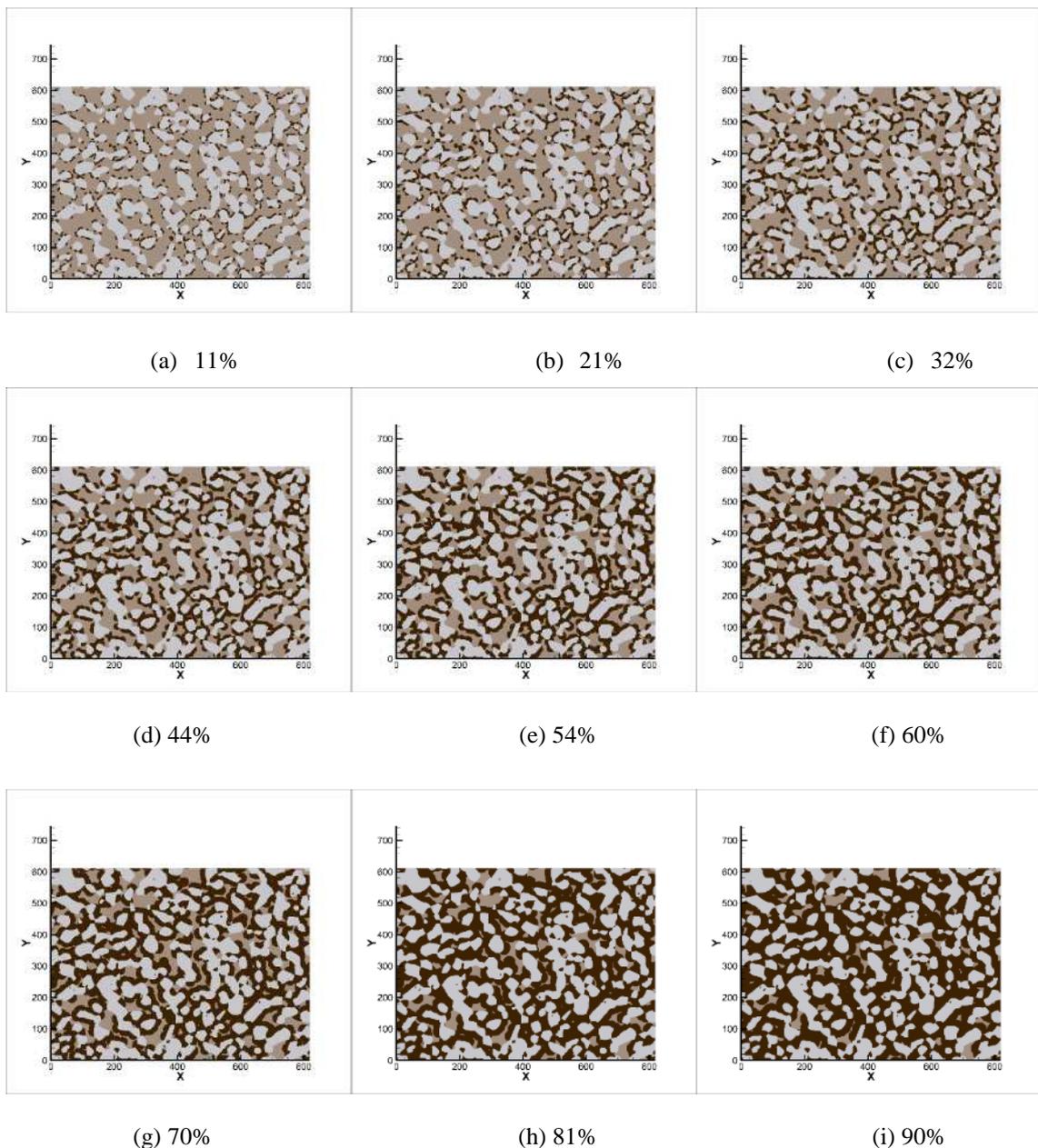


Figura 31 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 1200 núcleos.

Fonte: O autor, 2019.

6.5.4 Micrografias virtuais para simulação com 2400 núcleos

As micrografias virtuais obtidas com os dados da simulação computacional com 2400 núcleos podem ser vistas na Figura 32.

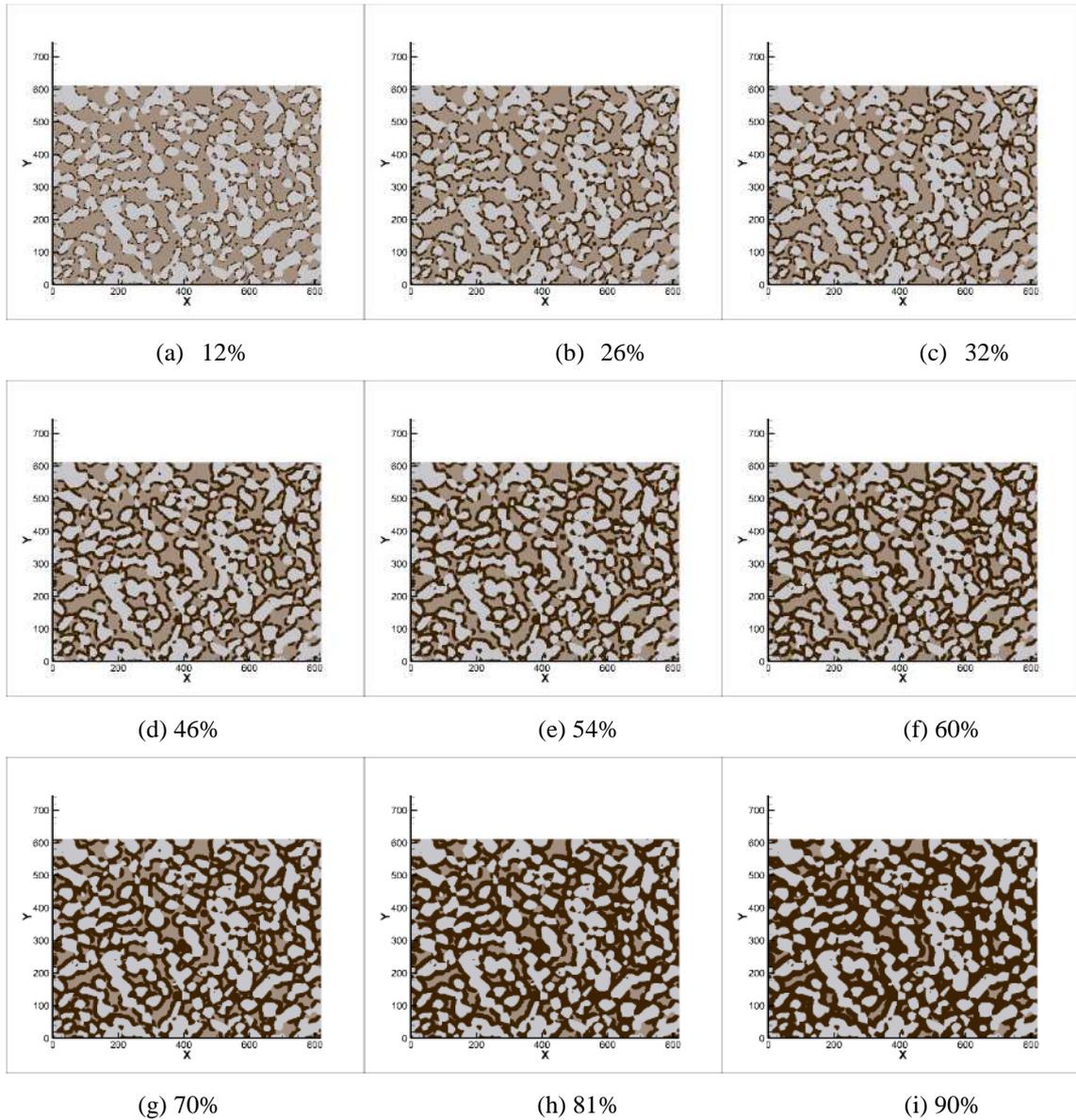


Figura 32 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 2400 núcleos.
Fonte: O autor, 2019.

6.5.5 Micrografias virtuais para simulação com 6000 núcleos

As micrografias virtuais obtidas com os dados da simulação computacional com 6000 núcleos podem ser vistas na Figura 33.

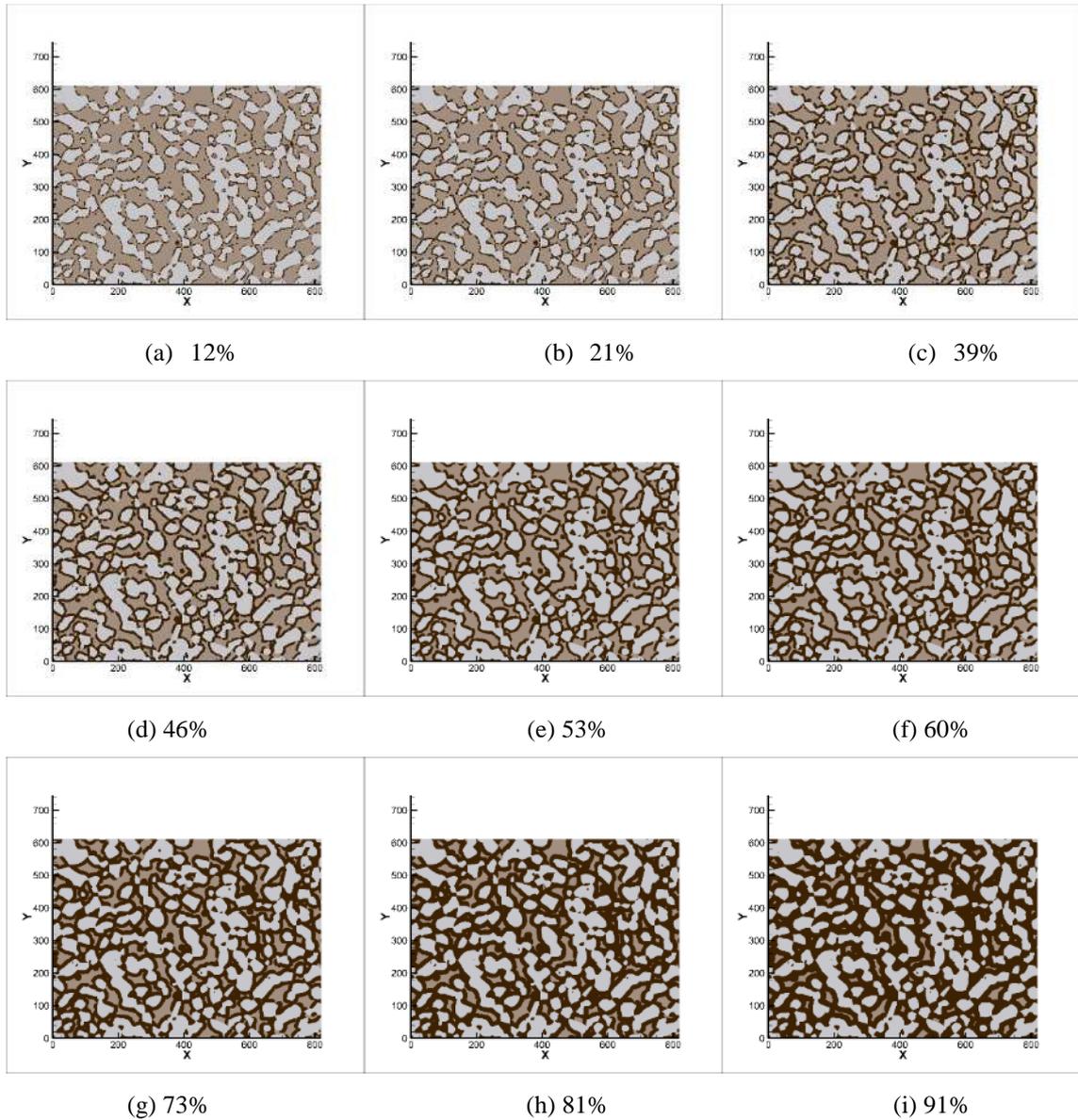


Figura 33 Micrografias geradas com a simulação de formação da fase sigma para 6000 núcleos.
Fonte: O autor, 2019.

Os resultados simulados através do programa desenvolvido utilizando o método do Cone Causal para crescimento da fase foram obtidos considerando-se que a fase austenita

permanecia constante e a fase sigma consumia totalmente a fase ferrita, ou seja, a fase sigma consumiu 100% da matriz.

6.5.6 Micrografias reais x virtuais

Comparando-se as micrografias reais obtidas do material envelhecido termicamente à 800°C via microscopia ótica com as micrografias virtuais obtidas nas simulações com 300, 600, 1200, 2400 e 6000 núcleos, observou-se que as micrografias virtuais com 6000 núcleos foram as que mais se assemelham às micrografias reais.

Na Figura 34 (a) é mostrada a micrografia real após 90 min de tratamento térmico com cerca de $11,94\% \pm 0,94$ de fração volumétrica e a micrografia virtual gerada após 12% de evolução da fase sigma obtendo cerca de 14,3% de fração volumétrica. Tanto a micrografia quanto a fração volumétrica ficaram bem próximas.

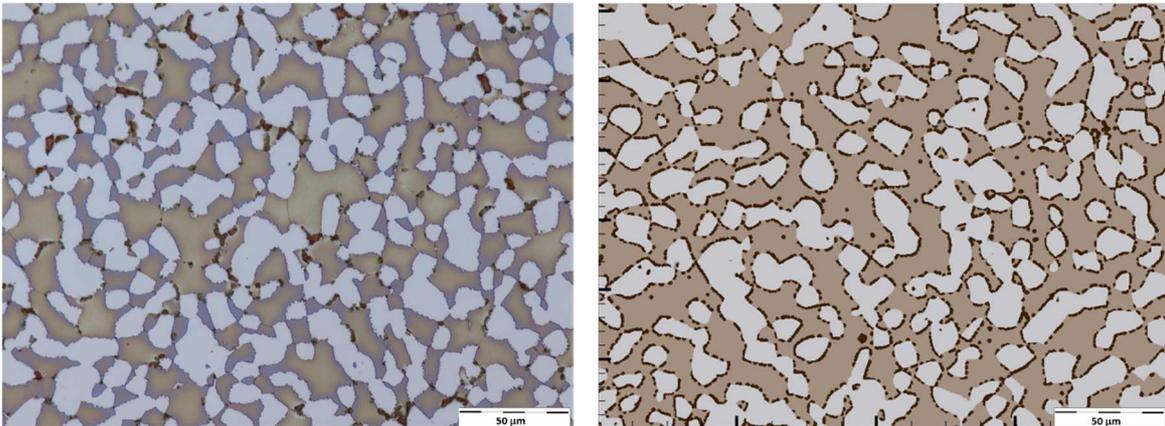


Figura 34 (a) Micrografia real da amostra envelhecida por 90 min e (b) Micrografia virtual com 6000 núcleos obtida em 12% da evolução da fase sigma.

Fonte: O autor, 2019.

Na Figura 35 (a) é mostrada a micrografia real após 240 min de tratamento térmico com cerca de $20,64\% \pm 2,06$ de fração volumétrica e a micrografia virtual gerada após 21% de evolução da fase sigma obtendo cerca de 28,4% de fração volumétrica.

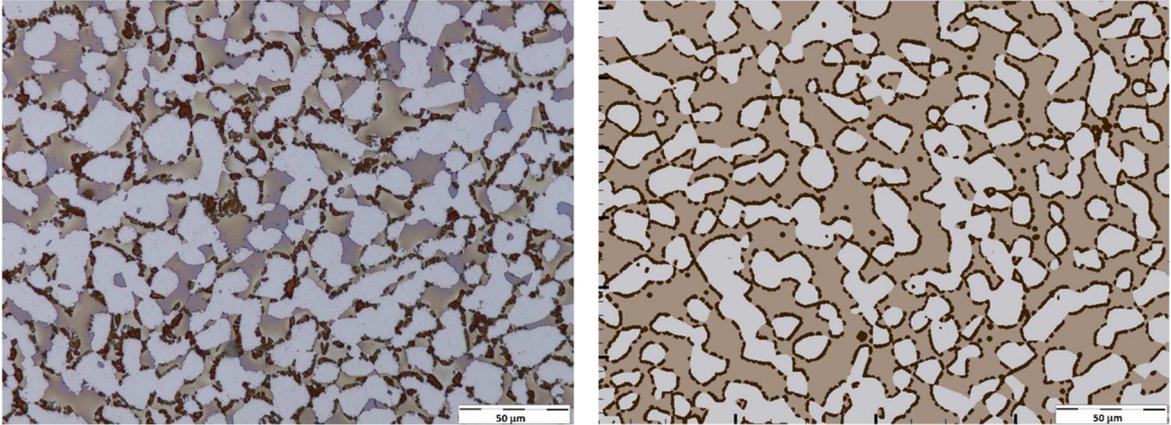


Figura 35 (a) Micrografia real da amostra envelhecida por 240 min e (b) Micrografia virtual obtida em 21% da evolução da fase sigma.

Fonte: O autor, 2019.

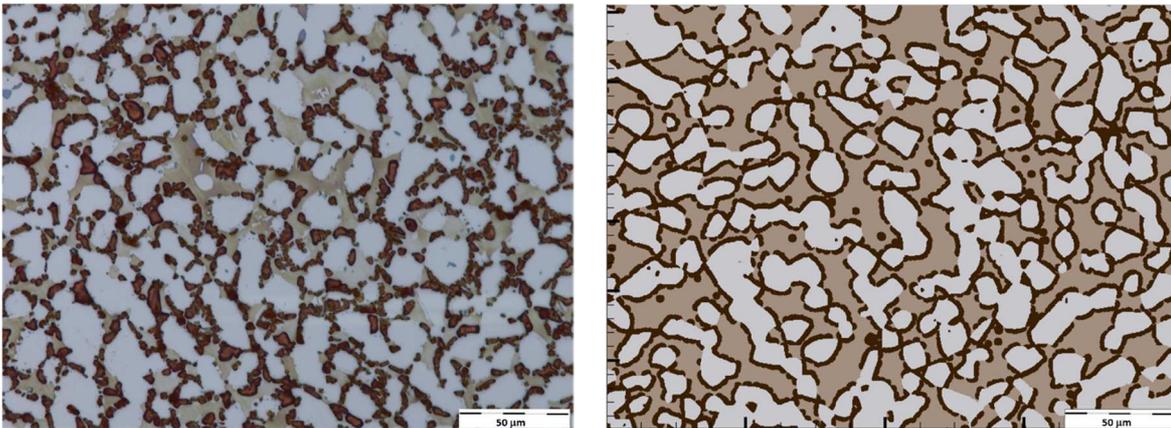


Figura 36 (a) Micrografia real da amostra envelhecida por 540 min e (b) Micrografia virtual obtida em 39% da evolução da fase sigma.

Fonte: O autor, 2019.

Na Figura 36 (a) é mostrada a micrografia real após 540 min de tratamento térmico com cerca de $32,76\% \pm 1,68$ de fração volumétrica e a micrografia virtual gerada após 39% de evolução da fase sigma obtendo cerca de 46,5% de fração volumétrica.

Das micrografias comparadas, as da Figura 36 apresentaram a maior diferença entre a fração volumétrica da fase sigma. A diferença foi aumentando à medida que a fase sigma foi evoluindo. Isso pode ter ocorrido pela velocidade ter sido considerada constante e/ou as comparações serem feitas visualmente em micrografias reais distintas e a mesma matriz da micrografia virtual.

6.6 PROPRIEDADES MECÂNICAS

A fração volumétrica do material utilizado nesse trabalho e a propriedade mecânica de limite de resistência à tração inicial de cada fase obtida experimentalmente são mostradas na Tabela 4:

Tabela 4 Limite de resistência a tração e fração volumétrica inicial
Fonte: Adaptado de [49]

Fases	Limite de resistência a tração (MPa)	Fração Volumétrica inicial (%)
Austenita	749	43
Ferrita	637	57
Sigma	1.129	0

Utilizando os dados da Tabela 4 e os resultados de fração volumétrica da fase sigma obtidos via simulação numérica na equação (15) da regra das misturas, foi possível obter a evolução do limite de resistência a tração do aço duplex com a formação da fase sigma mostrada no gráfico da Figura 37.

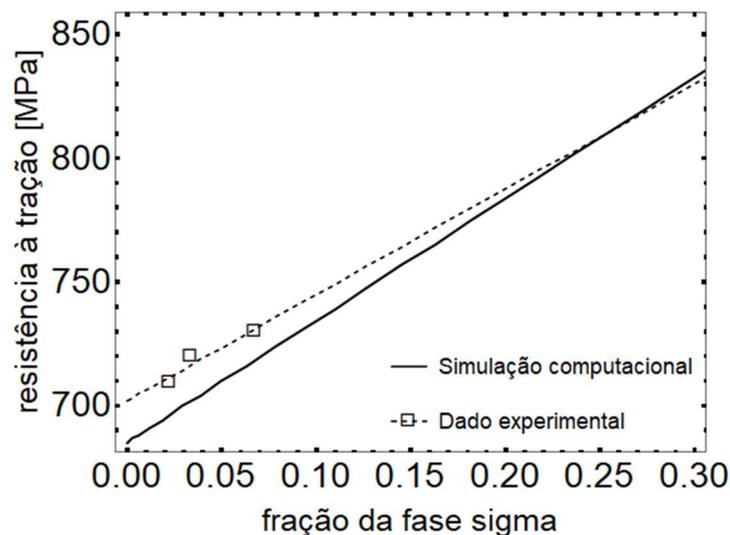


Figura 37 Evolução da propriedade mecânica do aço duplex SAF 2205 com a formação da fase sigma.
Fonte: O autor, 2019.

A partir de três dados experimentais e considerando que a formação da fase sigma em um aço duplex SAF 2205 envelhecido à 800°C se dá linearmente, observa-se no gráfico

mostrado na Figura 37 que o resultado obtido via simulação se aproximou do resultado experimental disponível em estudos anteriores.

O resultado simulado apresentou limite de resistência a tração inferior aos dados obtidos experimentalmente devido à composição inicial do material. O material utilizado nesse trabalho apresentou fração volumétrica de ferrita superior ao do material encontrado no trabalho referenciado [49].

Conhecida a propriedade mecânica inicial dos constituintes do material para determinada temperatura, foi possível prever a propriedade do material à medida em que houve variação da fração volumétrica de cada fase.

O limite de resistência à tração inicial do aço estudado é de 730 MPa, conforme exposto no Quadro 7. Com a formação da fase sigma, considerada uma fase deletéria, a resistência à tração do aço aumentou, conseqüentemente a dureza se elevou tornando o material mais frágil.

7 CONCLUSÕES

A formação da fase sigma em amostras de um aço inoxidável duplex SAF 2205 submetido à tratamento térmico de envelhecimento a 800°C nos tempos de 60, 90, 240 e 540 min foram investigadas por microscopia ótica. Além disso, a previsão da evolução do limite de resistência a tração do aço estudado foi comparada com dados disponíveis na literatura para validação da utilização da regra das misturas. Com base nos resultados, as seguintes conclusões podem ser destacadas:

- A fase sigma se formou nos contornos de grãos de ferrita e austenita, conforme previsto pela literatura;
- A utilização do modelo computacional, desenvolvido com auxílio da biblioteca OpenCV em um código escrito em C++, mostrou-se eficaz no processamento das micrografias geradas a partir das amostras analisadas em microscópio ótico;
- Foi possível utilizar o modelo de simulação de nucleação e crescimento, via método do Cone Causal, para formação da fase sigma em contornos de grãos ferríticos e o subsequente crescimento dentro da mesma a partir das micrografias reais;
- A simulação computacional permitiu a quantificação exata de todos os parâmetros microestruturais relevantes tais como: fração volumétrica transformada e comprimento de interfaces por unidade de área mediante alteração no número de núcleos;
- A simulação com 300 núcleos concordou com o método analítico de JMAK;
- A lei linear das misturas pode ser usada para prever a resistência à tração do aço estudado, com isso foi obtida a propriedade a cada evolução da formação da fase sigma;
- As micrografias virtuais obtidas na simulação com 6.000 núcleos foram as que mais de se assemelharam quando comparadas às micrografias reais;
- Com a simulação computacional, pode-se, entre outras coisas, gerar as possíveis microestruturas que o material poderia apresentar diante variações de parâmetros desejados;
- O modelo computacional desenvolvido para simular a nucleação e o crescimento da fase sigma, bem como a evolução de propriedades mecânicas do aço em função do surgimento dessa fase, apresentou os resultados esperados com esse trabalho.

8 SUGETÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Avaliar a utilização do cálculo de energia de ativação como critério de parada da formação da fase sigma e determinação da quantidade de núcleos.
- Aplicação de técnicas de caracterização microestrutural nas microestruturas 2D obtidas por simulação utilizando os seguintes parâmetros: parâmetro dúplex, parâmetro de dispersão e parâmetro de contiguidade.
- Modelamento em 3D a partir de micrografias reais.

9 BIBLIOGRAFIA

- [1] C. R. de Farias Azevedo, H. Boschetti Pereira, S. Woly nec, and A. F. Padilha, “An overview of the recurrent failures of duplex stainless steels,” *Eng. Fail. Anal.*, vol. 97, no. December 2018, pp. 161–188, 2019.
- [2] R. N. Gunn, *Duplex Stainless Steels*, 1st Editio. Woodhead Publishing, 1997.
- [3] R. Magnabosco, L. da Costa Morais, and D. C. dos Santos, “Use of composition profiles near sigma phase for assessment of localized corrosion resistance in a duplex stainless steel,” *Calphad Comput. Coupling Phase Diagrams Thermochem.*, vol. 64, no. October 2018, pp. 126–130, 2019.
- [4] G. da Fonseca, L. Barbosa, E. Ferreira, C. Xavier, and J. de Castro, “Microstructural, Mechanical, and Electrochemical Analysis of Duplex and Superduplex Stainless Steels Welded with the Autogenous TIG Process Using Different Heat Input,” *Metals (Basel)*, vol. 7, no. 12, p. 538, Dec. 2017.
- [5] D. M. Escriba, E. Materna-Morris, R. L. Plaut, and A. F. Padilha, “Chi-phase precipitation in a duplex stainless steel,” *Mater. Charact.*, vol. 60, no. 11, pp. 1214–1219, Nov. 2009.
- [6] K. H. Lo, C. H. Shek, and J. K. L. Lai, “Recent developments in stainless steels,” *Mater. Sci. Eng. R Reports*, vol. 65, no. 4–6, pp. 39–104, 2009.
- [7] Harry Bhadeshia; Robert Honeycombe, “STEELS AND PROPERTIES,” in *STEELS Microstructure and Properties*, Edition, F., Butterworth-Heinemann, 2017, p. 488.
- [8] British Stainless Steel Association, “The Discovery of Stainless Steel,” 2019. [Online]. Available: https://www.bssa.org.uk/about_stainless_steel.php?id=31. [Accessed: 15-Apr-2019].
- [9] K. Vanessa and S. Damin, “Aços inoxidáveis duplex : uma breve visão,” *Revista Liberato*, vol. 18, p. 132, 2017.
- [10] M. Knyazeva and M. Pohl, “Duplex Steels: Part I: Genesis, Formation, Structure,” *Metallogr. Microstruct. Anal.*, vol. 2, no. 2, pp. 113–121, 2013.
- [11] R. L. P. and P. R. R. A. F. Padilha, “Stainless Steel Heat Treatment,” in *Steel Heat Treatment Handbook*, Second., George E. Totten, Ed. Taylor & Francis Group, LLC, 2006, pp. 695–735.
- [12] S. S. M. Tavares, P. D. S. Pedrosa, J. R. Teodósio, M. R. Da Silva, J. M. Neto, and S.

- Pairis, "Magnetic properties of the UNS S39205 duplex stainless steel," *J. Alloys Compd.*, vol. 351, no. 1–2, pp. 283–288, 2003.
- [13] L. O. Luengas, "Lilia Olaya Luengas Simulação Física e Caracterização Microestrutural e Mecânica da Zona Termicamente Afetada (ZTA) em Aços Inoxidáveis Duplex Lilia Olaya Luengas Simulação Física e Caracterização Microestrutural e Mecânica da Zona Termicamente Afetada," PUC-Rio, 2017.
- [14] V. Muthupandí, P. Bala Srinivasan, S. K. Seshadri, and S. Sundaresan, "Effect of weld metal chemistry and heat input on the structure and properties of duplex stainless steel welds," *Mater. Sci. Eng. A*, vol. 358, no. 1–2, pp. 9–16, 2003.
- [15] J. M. Pardal, S. S. M. Tavares, M. da P. C. Fonseca, J. A. de Souza, L. M. Vieira, and H. F. G. de Abreu, "Deleterious phases precipitation on superduplex stainless steel UNS S32750: characterization by light optical and scanning electron microscopy," *Mater. Res.*, vol. 13, no. 3, pp. 401–407, 2010.
- [16] IMO, *Orientações práticas para processamento dos aços inoxidáveis Duplex*. 2012.
- [17] D. C. dos S. R. M. C. de M. Neto, "FORMAÇÃO DE FASE SIGMA NO AÇO INOXIDÁVEL," 2013.
- [18] M. Senatore, L. Finzetto, and E. Perea, "Estudo comparativo entre os aços inoxidáveis dúplex e os inoxidáveis AISI 304L/316L," *Rem Rev. Esc. Minas*, vol. 60, no. 1, pp. 175–181, 2007.
- [19] A. F. P. and R. L. PLAUT, "Phase Transformation and Microstructure," in *Duplex Stainless Steels*, First., I. Alvarez-Armas and S. Degallaix-Moreuil, Eds. Hoboken, NJ, USA: John Wiley & Sons, Inc., 2009, pp. 1–437.
- [20] D. C. dos Santos and R. Magnabosco, "Kinetic Study to Predict Sigma Phase Formation in Duplex Stainless Steels," *Metall. Mater. Trans. A Phys. Metall. Mater. Sci.*, vol. 47, no. 4, pp. 1554–1565, 2016.
- [21] K. W. W. Joseph K.L. Lai, C.H. Shek, "A novel technique to detect hot spots in high temperature boilers," *Sensors Actuators, A Phys.*, vol. 95, no. 1, pp. 51–54, 2001.
- [22] R. Magnabosco, "Kinetics of Sigma Phase Formation In a Duplex Stainless Steel 2 . Experimental Procedure," *Mater. Res.*, vol. 12, no. 3, pp. 321–327, 2009.
- [23] G. S. da Fonseca, P. M. de Oliveira, M. G. Diniz, D. V. Bubnoff, and J. A. de Castro, "Sigma Phase in Superduplex Stainless Steel: Formation, Kinetics and Microstructural Path," *Mater. Res.*, vol. 20, no. 1, pp. 249–255, 2017.
- [24] M. Pohl, O. Storz, and T. Glogowski, "Effect of Sigma-Phase Morphology on the

- Properties of Duplex Stainless Steels,” *Microsc. Microanal.*, vol. 11, no. S02, pp. 230–231, 2005.
- [25] F. C. P. Junior, W. R. Reick, and A. F. Padilha, “Estudo Comparativo entre a Precipitação da Fase Sigma em um Aço Inoxidável Superferrítico e em um Aço Inoxidável Dúplex.,” in *Congresso Brasileiro De Engenharia E Ciência Dos Materiais*, 2000, no. 14, pp. 29301–29309.
- [26] A. B. R. de A. Graça, “Desenvolvimento de Ferramenta Computacional para Criação de Domínios Discretos em 3D via Imagens 2D,” Universidade Federal Fluminense, 2019.
- [27] P. R. F. A. P. Rios, *Transformações de fase*. Artliber, 2007.
- [28] P. R. Rios and A. F. Padilha, *TRANSFORMAÇÃO DE FASE*. 2007.
- [29] M. R. Johnson WA, “Reaction kinetics in processes of nucleation and growth,” *Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng.*, vol. 135, pp. 416–441, 1939.
- [30] A. Kolmogorov, “The statistics of crystal growth in metals.,” *Isvestiia Acad. Nauk SSSR - Serii Mat.*, vol. 1, pp. 333–339, 1937.
- [31] M. Avrami, “Kinetics of phase change. I: General theory,” *J. Chem. Phys.*, vol. 7, no. 12, pp. 1103–1112, 1939.
- [32] M. Avrami, “Kinetics of phase change. II Transformation-time relations for random distribution of nuclei,” *J. Chem. Phys.*, vol. 8, no. 2, pp. 212–224, 1940.
- [33] M. Avrami, “Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change. III,” *J. Chem. Phys.*, vol. 9, no. 2, pp. 177–184, 1941.
- [34] R. A. Vandermeer and B. B. Rath, “Modeling recrystallization kinetics in a deformed iron single crystal,” *Metall. Trans. A*, vol. 20, no. 3, pp. 391–401, 1989.
- [35] P. R. Rios and A. F. Padilha, “Microstructural path of recrystallization in a commercial Al-Mn-Fe-Si (AA3003) alloy,” *Mater. Res.*, vol. 6, no. 4, pp. 605–613, 2005.
- [36] S. C. de Oliveira, “Simulação computacional 3-d e modelamento analítico das reações simultâneas com aplicações à recristalização de um aço IF,” Universidade Federal Fluminense, Volta Redonda, 2013.
- [37] C. P. S. Giraldo, “Precipitação de fases intermetálicas na zona afetada pelo calor de temperatura baixa (ZACTB) na soldagem multipasse de aços inoxidáveis duplex.,” Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2001.
- [38] R. Romana, “Cinética De Formação De Fase Sigma Entre 700°C E 900°C No Aço Inoxidável Superdúplex Uns S32750 (Saf 2507),” Centro Universitário da FEI, 2009.

- [39] P. Mukhopadhyay, M. Loeck, and G. Gottstein, “A cellular operator model for the simulation of static recrystallization,” *Acta Mater.*, vol. 55, no. 2, pp. 551–564, 2007.
- [40] Wesley Luiz da Silva. Assis, “Investigação do Efeito da Nucleação, da Velocidade de Crescimento e da Distribuição da Energia Armazenada na Recristalização pelo Método do Autômato Celular em Três Dimensões,” Universidade Federal Fluminense, 2006.
- [41] P. R. Rios, E. Villa, and S. C. De Oliveira, “New methodology to model simultaneous and sequential reactions: Main results and applications,” *Mater. Sci. Forum*, vol. 706–709, pp. 149–156, 2012.
- [42] E. M. Bortoleto, “Modelamento numérico-computacional das transformações de fase nos tratamentos térmicos de aços,” Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2010.
- [43] T. F. dos. Prazeres, “Análise de erros na reconstrução em 3D por seccionamento em série: um estudo em microestrutura simulada Dissertação,” Universidade Federal Fluminense, 2019.
- [44] P. R. Rios and E. Villa, “Transformation kinetics for inhomogeneous nucleation,” *Acta Mater.*, vol. 57, no. 4, pp. 1199–1208, 2009.
- [45] A. L. M. Alves, “TRANSFORMAÇÕES DE FASE SEQUENCIAIS,” Universidade Federal Fluminense, 2019.
- [46] James F. Shackelford, *Introdução à ciência dos materiais para engenheiros*, 6ª Edição. Pearson Prentice Hall, 2008.
- [47] C. P. da S. Santos and J. R. R. Bichara, “Estudo Experimental das Propriedades Mecânicas para Compósito em Fibra de Carbono e Matriz Epóxi Pipefix,” CEFET/RJ, 2015.
- [48] E. P. Moreira Junior *et al.*, “Simulação computacional de transformação de fases a partir micrografias reais,” in *Anais do Congresso Anual da ABM*, 2017, vol. 72, pp. 2870–2879.
- [49] M. A. Martins, G. L. Faria, and T. R. de Oliveira, “Influência De Diferentes Tratamentos Térmicos De Recozimento Nas Frações De Fases E Nas Propriedades Mecânicas Do Aço Inoxidável Duplex Uns S31803,” *Tecnol. em Metal. Mater. e Mineração*, vol. 15, no. 4, pp. 458–464, 2018.

10 APÊNDICE

Programa de processamento da imagem digital

```
// Exemplo.cpp : Defines the entry point for the console application.
//

#include "stdafx.h"
// #include <cv.h>
#include <iostream>
// #include <highgui.h>
#include "opencv2\core\core.hpp"
#include "opencv2\highgui\highgui.hpp"
#include <opencv2/imgproc/imgproc.hpp>

using namespace cv;
using namespace std;

int main()
{
    int num_imgs = 8;

    Mat image, gray_image, binary_image;

    for (int i = 0; i < num_imgs; i++)
    {
        image = imread( "Imagens/Aco2/0" + to_string(i) + ".png" ,
CV_LOAD_IMAGE_COLOR);

        //namedWindow("Janela" + to_string(i), WINDOW_AUTOSIZE);
        //imshow("Janela" + to_string(i), image);

        cvtColor(image, gray_image, CV_BGR2GRAY);

        //imwrite("Imagens/N0_cinza.png", gray_image); // Para salvar as
imagens em tons de cinza

        threshold(gray_image, binary_image, 120, 255, CV_THRESH_BINARY);

        //cvtColor(gray_image, binary_image, CV_THRESH_BINARY);

        imwrite("Imagens/Aco2/Binarizadas_Aco2/0" + to_string(i) + ".png",
binary_image);
    }

    waitKey();

    return 0;
}
```